



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA CHEMICKÁ

FACULTY OF CHEMISTRY

ÚSTAV CHEMIE POTRAVIN A BIOTECHNOLOGIÍ

INSTITUTE OF FOOD SCIENCE AND BIOTECHNOLOGY

**OVĚŘENÍ METODY STANOVENÍ ALERGENNÍCH
VONNÝCH LÁTEK V NEČOKOLÁDOVÝCH
CUKROVINKÁCH**

VERIFYING OF THE METHOD FOR ASSESSMENT OF ALLERGENIC AROMA COMPOUNDS IN
SWEETS

DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Bc. Adriena Maňáková

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

doc. Ing. Eva Vítová, Ph.D.

BRNO 2019

Zadání diplomové práce

Číslo práce: FCH-DIP1307/2018 Akademický rok: 2018/19
Ústav: Ústav chemie potravin a biotechnologií
Studentka: **Bc. Adriena Maňáková**
Studijní program: Chemie a technologie potravin
Studijní obor: Potravinářská chemie a biotechnologie
Vedoucí práce: **doc. Ing. Eva Vítová, Ph.D.**

Název diplomové práce:

Ověření metody stanovení alergenních vonných látek v nečokoládových cukrovinkách

Zadání diplomové práce:

1. Zpracujte literární přehled dané problematiky:
 - stručná charakteristika nečokoládových cukrovinek
 - vonné látky v cukrovinkách – přehled, vznik v průběhu výroby
 - alergenní vonné látky
 - možnosti stanovení vonných látek v cukrovinkách – princip, provedení, přehled aplikací
 - možnosti senzorického hodnocení cukrovinek – přehled aplikací
2. Ověřte optimální podmínky a vybrané validační parametry HS–SPME–GC–MS metody stanovení vonných látek
3. Identifikujte a kvantifikujte alergenní vonné látky ve vzorcích nečokoládových cukrovinek
4. Pomocí vhodných senzorických metod zhodnoťte jejich senzorickou kvalitu
5. Posuďte vliv identifikovaných sloučenin na senzorickou kvalitu vzorků, diskutujte možné nežádoucí účinky

Termín odevzdání diplomové práce: 10. 5. 2019:

Diplomová práce se odevzdává v děkanem stanoveném počtu exemplářů na sekretariát ústavu. Toto zadání je součástí diplomové práce.

Bc. Adriena Maňáková
student(ka)

doc. Ing. Eva Vítová, Ph.D.
vedoucí práce

prof. RNDr. Ivana Márová, CSc.
vedoucí ústavu

V Brně dne 31.1.2019

prof. Ing. Martin Weiter, Ph.D.
děkan

ABSTRAKT

Tato diplomová práce se zabývá stanovením aromaticky aktivních látek v nečokoládových cukrovinkách a jejich vlivem na senzorickou kvalitu. V teoretické části je popsána technologie jejich výroby od surovin až po konečný výrobek. Dále jsou charakterizovány aromaticky aktivní látky včetně těch potenciálně alergenních a stručně je popsána metoda jejich stanovení pomocí mikroextrakce pevnou fází a plynové chromatografie s hmotnostní spektrometrií. Na závěr jsou stručně popsány použité senzorické metody.

V rámci experimentální části byla provedena optimalizace vybraných parametrů HS-SPME-GC-MS metody, identifikace těkavých látek ve vzorcích kandytových cukrovinek, identifikace a kvantifikace 24 potenciálních vonných alergenů a následně senzorická analýza těchto vzorků. Jako modelové vzorky byly použity dropsy, zakoupené v běžné tržní síti.

Mezi vzorky byly nalezeny rozdíly v počtu a druhu těkavých sloučenin. Celkem bylo ve vzorcích identifikováno 393 těkavých sloučenin, včetně 19 alergenních.

ABSTRACT

This thesis deals with the assessment of aroma active compounds in non-chocolate confectionery and their influence on sensory quality. In the theoretical part the production technology of non-chocolate confectionery from raw materials to final product is described. Furthermore, aroma active substances, including those potentially allergenic, are characterized, and the method for their determination by solid phase microextraction and gas chromatography with mass spectrometry is briefly described. Sensory analysis and sensory evaluation methods are briefly described.

Within experimental part of the work selected parameters of the HS-SPME-GC-MS method were optimized, aroma compounds in samples of hard candies were identified, and 24 potentially allergenic aroma substances were identified and quantified. Finally, a sensory analysis of these samples was performed.

Differences in the number and type of volatile compounds were found between the samples. Overall 393 compounds were identified including 19 allergens.

KLÍČOVÁ SLOVA

cukrovinky, senzorická analýza, alergenní vonné látky, SPME, GC-MS

KEYWORDS

sweets, sensory analysis, allergenic aroma compounds, SPME, GC-MS

MAŇÁKOVÁ, Adriena. Ověření metody stanovení alergenních vonných látek v nečokoládových cukrovinkách. Brno, 2019. Diplomová práce. Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie potravin a biotechnologií. Vedoucí práce Eva Vítová.

PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci vypracovala samostatně a že všechny použité literární zdroje jsem citovala správně a úplně. Diplomová práce je z hlediska obsahu majetkem Fakulty chemické VUT v Brně a může být využita ke komerčním účelům jen se souhlasem vedoucího diplomové práce a děkana FCH VUT.

podpis studenta

Poděkování:

Ráda bych touto cestou poděkovala vedoucí mé diplomové práce doc. Ing. Evě Vítové, Ph.D za odborné vedení, cenné rady, připomínky a ochotu při zpracovávání této práce. Děkuji také studentům a zaměstnancům VUT, kteří se ochotně zúčastnili senzorické analýzy. Na závěr bych ráda poděkovala svým rodičům, kteří mi umožnili studium a vždy mě plně podporovali.

1. ÚVOD.....	7
2. TEORETICKÁ ČÁST	8
2.1 Nečokoládové cukrovinky	8
2.2 Suroviny pro výrobu nečokoládových cukrovinek	9
2.2.1 Sladidla	10
2.2.2 Ovocné produkty	10
2.2.3 Lešticí látky.....	10
2.2.4 Suroviny obsahující bílkoviny	11
2.2.5 Želírující látky	11
2.2.6 Rostlinné gumy	11
2.2.7 Senzoricky aktivní suroviny v cukrovinkách.....	11
2.3 Technologie výroby nečokoládových cukrovinek	13
2.4 Vonné látky v cukrovinkách	14
2.4.1 Vonné látky v ovoci	15
2.4.2 Legislativa v oblasti vonných látek v potravinách	17
2.4.3 Potenciálně alergenní vonné látky	17
2.5 Možnosti stanovení vonných látek.....	21
2.5.1 Izolace vonných látek	22
2.5.2 Plynová chromatografie.....	25
2.5.3 Detektory používané při stanovení vonných látek	25
2.6 Možnosti senzorického hodnocení cukrovinek	26
2.6.1 Podmínky pro senzorickou analýzu	27
2.6.2 Metody senzorické analýzy	27
3. EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST	29
3.1 Laboratorní vybavení a chemikálie	29
3.1.1 Plyny	29
3.1.2 Přístroje	29
3.1.3 Pracovní pomůcky	29
3.1.4 Chemikálie	29
3.2 Analyzované vzorky	30
3.3 Metoda HS-SPME-GC/MS.....	33
3.3.1 Podmínky SPME extrakce	33
3.3.2 Podmínky GC-MS analýzy	33
3.3.3 Vyhodnocení výsledků HS-SPME-GC-MS analýzy.....	33
3.4 Senzorická analýza	33
3.5 Statistické zpracování výsledků	34

4.	VÝSLEDKY A DISKUZE	35
4.1	Optimalizace vybraných parametrů HS-SPME-GC-MS metody	35
4.1.1	Průtok nosného plynu	36
4.1.2	Teplotní program	36
4.1.3	Ověření vybraných validačních parametrů metody	37
4.2	Identifikace těkavých látek ve vzorcích	40
4.2.1	Vzorky výrobce A (Česká republika)	41
4.2.2	Vzorky výrobce B (Česká republika)	52
4.2.3	Vzorky výrobce C (Polsko)	63
4.2.4	Vzorky výrobce D (Německo)	72
4.2.5	Vzorky výrobce E (Česká republika)	79
4.3	Srovnání počtu a obsahu identifikovaných sloučenin ve vzorcích od různých výrobců	86
4.4	Identifikace a kvantifikace alergenních AAL ve vzorcích	90
4.5	Senzorická analýza	94
4.5.1	Hodnocení barvy	94
4.5.2	Hodnocení vůně	98
4.5.3	Hodnocení chuti	100
4.5.4	Profilový test	103
4.5.5	Celková přijatelnost vzorků	105
5.	ZÁVĚR	107
6.	SEZNAM POUŽITÝCH ZKRATEK	109
7.	SEZNAM CITOVANÝCH ZDROJŮ	110
8.	SEZNAM PŘÍLOH	116
9.	PŘÍLOHY	118

1. ÚVOD

Asi většina lidí zná pocit, kdy má neodbytnou chuť na něco sladkého. Dnešní trh nabízí širokou škálu výrobků, kterými můžeme toto nutkání ukojit. Dle posledních průzkumů agentury MEDIAN (Market & Media & Lifestyle – TGI, 1. a 2. kvartál 2016) sáhne až 18,7 % českých spotřebitelů alespoň jednou týdně po bonbonech nebo jiných nečokoládových cukrovinkách. I přes takto obrovskou spotřebu, vzhledem k jejich velkému výběru na trhu musí výrobci přicházet s výrobky atraktivnějšími, čehož bývá často docíleno přidavkem aditivních látek, které kromě zajištění hygienické nezávadnosti, mají funkci zvýšení kvality a přijatelnosti potraviny/cukrovinky pro spotřebitele. Mezi tyto senzorické aditivní látky patří i látky vonné, z nichž některé však mohou mít negativní vliv na lidský organismus, a sice mohou u některých jedinců vyvolávat alergické reakce. Jedná se o 26 potenciálně alergenních látek, jejichž výskyt a množství v potravinách není dosud v České republice legislativně řízeno. Pouze u kosmetických výrobků jsou určeny limity, kdy musí být tyto vonné látky uvedeny na obalu.

Tuzemský trh nečokoládových cukrovinek se vyznačuje několika trendy, kromě kvality je jedním z nich nárůst poptávky po zdravějších variantách, což v praxi znamená použití přírodních barviv a aromat pro jejich výrobu. Tato barviva a aroma jsou většinou součástí ovocných a zeleninových šťáv a extraktů; jelikož je ale většina vonných látek rostlinného původu, není v cukrovinkách vyloučena přítomnost vonných alergenů ani z těchto přírodních surovin. Je tedy žádoucí se touto problematikou v oblasti cukrovinek zabývat.

Tato práce se v teoretické části zabývá stručnou charakteristikou nečokoládových cukrovinek, vonnými látkami, včetně 26 potenciálně alergenních, a možnými metodami pro jejich stanovení. V praktické části byla optimalizována a validována metoda HS-SPME-GC-MS pro stanovení vonných látek v cukrovinkách, zvláště vhodná pro stanovení vonných látek potenciálně alergenních. Metoda byla aplikována na vybrané vzorky cukrovinek typu dropsů dostupných v běžné tržní síti; ve vzorcích byly sledovány těkavé látky, potenciálně alergenní vonné látky a zároveň byla posuzována související senzorická kvalita vzorků.

2. TEORETICKÁ ČÁST

V teoretické části je shrnuta základní charakteristika nečokoládových cukrovinek, jejich rozdělení a suroviny pro jejich výrobu. Dále se zabývá vonnými látkami používanými v potravinářství, jejich stručnou legislativou a také vonnými látkami, které se v potravinářství používají a byly kosmetickou legislativou označeny za potenciálně alergenní. Na závěr jsou stručně popsány metody pro stanovení vonných látek v cukrovinkách a princip jejich senzorického hodnocení.

2.1 Nečokoládové cukrovinky

Cukrovinky lze rozdělit podle obsahu kakaových součástí na čokoládové, zahrnující čokolády, a nečokoládové. Čokoládové cukrovinky obsahují více než 5 % kakaových součástí a nečokoládové méně než 5 % [1, 2].

Legislativním předpisem zabývajícím se cukrovinkami je vyhláška číslo 43/2005 Sb., jejíž součástí je i rozdělení nečokoládových cukrovinek na skupiny a podskupiny a také jejich základní charakteristika (viz tabulka 1).

Tabulka 1: Členění nečokoládových cukrovinek na skupiny a podskupiny a jejich základní charakteristika [3]

Skupina	Podskupina	Popis
karamely	tukové s jádrovinami, s ovocnou příchutí, mléčné, kakaové a kávové	tvárná konzistence, do určité míry žvýkavé, s různou příchutí
dražé	podle druhu vložek, cukrová, želé, jádroviny, sušené ovoce, marcipán a arašídy	tužší až tvrdá konzistence s různými vložkami, s náblem zejména cukru
želé		konzistence gelu vzniklá přidáním želatiny, zejména pektinu, agaru, škrobu nebo želatiny
rahat		škrobové želé různých tvarů obalených směsí práškového cukru a škrobu
chalva		šlehaná kandytová hmota s pěnoucí látkou pastovité konzistence, popř. s přidáním suchých skořápkových plodů a tuku
turecký med		šlehaný cukrosirupový roztok s bílkem, popř. s přidáním suchých skořápkových plodů
lékořicové cukrovinky		směs cukru, glukózy a sirupu a mouky, popř. dalších surovin, jejichž charakteristickou složkou je výtažek z lékořice
pěnové cukrovinky (marshmallow)		lehčená, pěnovitá, žvýkavá konzistence, popř. s jemnými částicemi směsí práškového cukru nebo škrobu anebo jejich kombinací
komprimáty		vyráběny lisováním ochucených a obarvených práškových směsí, zejm. ve tvaru čítek nebo tablet

Tabulka 1: Členění nečokoládových cukrovinek na skupiny a podskupiny a jejich základní charakteristika – pokračování [3]

Skupina	Podskupina	Popis
žvýkačky	balónkové, plátkové, dražované	výrazně gumovitá až tažná konzistence s různými příchutěmi
dropsy		neplněné, z kandytové hmoty, složené převážně z cukrů a glukózového sirupu, různě tvarované, různé barvy a chuti, tvrdá konzistence
roksy		tvrdá konzistence, podobné dropsům, ve tvaru špalíček, tyčinek nebo lízátek, které mohou mít na průřezu barevné obrazce z ochucených kandytových hmot
furé	s tukovou/cukernou náplní	z kandytové hmoty, na povrchu matné, sklovité, tvrdé konzistence obsahující uvnitř minimálně 13 % polotuhé nebo tekuté náplně
marcipán		polotuhá konzistence, různé tvary vyrobené nejméně z 1 dílu surové marcipánové hmoty (min. 50 % loupáných mandlí a nejvýše 50 % cukru) a nejvýše 1 dílu cukrové moučky, popř. přibarvené, posypané, zdobené
fondánové cukrovinky		polotuhá až tuhá konzistence cukerné hmoty, popř. s přidavkem dalších látek s jemnou krystalickou strukturou

Základem výroby většiny cukrovinek je příprava roztoku cukru, glukózového sirupu, případně želírujícího prostředku. Nečokoládové cukrovinky lze rozdělit do dvou skupin, na cukrovinky s vykrytalizovanou a nevykrytalizovanou sacharózou. Mezi představitele cukrovinek s vykrytalizovanou sacharózou patří zejména fondán, komprimáty a marcipán. Mezi cukrovinky s nevykrytalizovanou sacharózou patří kandyty, různé druhy želé a karamel [1, 4].

V experimentální části této práce byly analyzovány cukrovinky s nevykrytalizovanou sacharózou tvrdé konzistence, tzv. kandyty, dle platné legislativy patřící do skupiny „dropsy“. Těmto bude v následujících kapitolách věnována pozornost.

2.2 Suroviny pro výrobu nečokoládových cukrovinek

Hlavní surovinou pro výrobu cukrovinek jsou extra bílý cukr, bílý cukr, glukózový nebo maltózový sirup (definice těchto surovin je uvedena ve vyhlášce číslo 43/2005). U cukrovinek se sníženou energetickou hodnotou nebo cukrovinek určených pro diabetiky je cukr nahrazován cukernými alkoholy nebo sladidly syntetickými (vyhláška č. 4/2008 Sb.) [2, 4, 5].

Kromě sladkých látek se k výrobě cukrovinek používají suroviny obsahující bílkoviny (želatina, mléko, vejce, sójové bílkoviny), polysacharidy a jejich deriváty (škrob, pektin, agar apod.), tuky (máslo, margarín), emulgátory a aditiva jako jsou například aroma, barviva, vosky a laky. U některých výrobků jsou důležitou součástí také jádroviny, ořechy, mandle, kokos, pistácie a káva. Vzhledem ke zvýšenému zájmu o zdravou výživu jsou nedílnou součástí některých cukrovinek také různé ovocné produkty (dřeně, sirupy, datle, rozinky a fíky) [1, 2].

2.2.1 Sladidla

Sladidla dodávají potravině nejen sladkou chuť, ale mohou potravinu obohacovat také o další sensorické vlastnosti (barvu a vůni), zvyšovat její energetickou hodnotu a při vyšších koncentracích i mikrobiální stálost [6].

Nejčastěji používaný sacharid při výrobě cukrovinek je sacharóza, jejíž sensorickou úlohou není pouze dosažení sladkého vjemu, ale také docílení tzv. pocitu chuťové plnosti, který při použití náhradních sladidel nebývá dosažen. Zdrojem sacharózy je cukerná řepa, cukrová třtina, ale také datlovník, javor cukrodárný a různé druhy palem. Dalšími cukernými surovinami jsou glukóza, fruktóza, invertní cukr, laktóza, škrobové a fruktózové sirupy a med [1, 2, 6].

Ze zdravotního hlediska je ale používání glycidů (cukrů, sacharidů) vyloučeno u osob trpících cukrovkou. Léčení těchto osob je zaměřeno kromě odborné léčby také na konzumaci potravin obsahujících náhradní sladidla. Tato sladidla však mohou hrát i významnou roli v jiné souvislosti, a to v prevenci zubního kazu a také u potravin a nápojů se sníženou energetickou hodnotou [6, 7].

Náhradní sladidla lze rozdělit dle původu na sladidla přírodní (thaumatin, steviosid), syntetická identická s přírodními (cukerné alkoholy např. sorbitol, xylitol, maltitol, izomalt) a syntetická (např. acesulfam K, aspartam, sacharin, cyklamát) [8, 9]. Cukerné alkoholy se používají pro výrobu nízkokalorických cukrovinek a cukrovinek pro diabetiky (především žvýkačky). Výhodou cukerných alkoholů při výrobě cukrovinek je jejich vyšší bod varu oproti roztokům sacharózy a škrobového sirupu, nepodléhají tedy Maillardově reakci. Syntetická náhradní sladidla jsou látky s vyšší sladivostí, nízkou energetickou hodnotou a často termolabilní [1, 8, 9–12].

2.2.2 Ovocné produkty

Využití ovoce při výrobě cukrovinek se těší čím dál tím většímu zájmu a lze ho použít v různé formě. Mezi ovocné suroviny patří různé dřeně, měli a sirupy, které jsou součástí různých náplní a používají se také při výrobě ovocného želé. Podstatnou skupinou je i sušené ovoce, především fíky, datle, sultánky, rozinky a korintky, které se používají k ochucení různých hmot [1, 6].

2.2.3 Lešticí látky

Lešticí látky jsou látky, které po nanesení na vnější povrch udělují potravině lesklý vzhled nebo vytváří ochranný povlak. Mezi tyto látky nepatří povlaky, které jsou jedlé nebo snadno odstranitelné. Lešticí látky se používají především k úpravě povrchů dražé, cukrovinek, bonbónů, snacků, ořechových jader, ovoce a doplňků stravy [9, 12, 15].

K leštění cukrovinek se používá řada vosků rostlinného i živočišného původu. Z rostlinných vosků se nejčastěji používá vosk karnaubský, který se získává z listů a pupenů palmového stromu *Copernicia cerifera*. Dalším rostlinným voskem je i vosk kandeliový, který lze získat z několika druhů rostlin patřících do čeledi *Euphorbiaceae*. Zástupcem živočišných vosků používaných při výrobě cukrovinek je včelí vosk [1, 9, 16].

Jako ochranná vrstva pro dražé a někdy také i čokoládových cukrovinek se používají různé laky, což nejčastěji bývají ethanolické roztoky, ve kterých jsou rozpuštěny vosky šelak (pryskyřice získávaná z výměšku hmyzu), sandrak (pryskyřice cypřišovitě dřeviny) a benzoe (pryskyřice získávaná z kůry několika druhů stromů rodu *Styrax*) [1, 16, 17].

2.2.4 Suroviny obsahující bílkoviny

Mezi suroviny obsahující bílkoviny se řadí sušené mléko (výroba karamel), sušené bílky (pěnotvorné činidlo), sójová mouka (součást vložek máčených cukrovinek) a v neposlední řadě také želatina [1].

Želatina se získává hydrolýzou z kolagenu, který se nalézá v řadě živočišných tkání (kůže, kosti a spojovací tkáně). Potravinářská želatina je bezbarvá, bez zápachu a bez chuti, bobtná ve studené vodě, rozpouští se za horka a chladnutím vytváří gel. Želatina se používá nejen k výrobě cukrovinek typu želé, ale pro svou schopnost tvorby pěny také pro výrobu šlehaných cukrovinek a také jako látka zabraňující krystalizaci [1, 2, 6].

2.2.5 Želírující látky

Želírující látky jsou látky, které vytváří gel (rosol) a udělují tím potravině její texturu. Mezi tyto látky patří již výše zmíněná želatina a také želírující polysacharidy. Používají se do cukrovinek typu želé. Nejběžněji používané želírující polysacharidy jsou agar, pektin a modifikované škroby [1, 6].

Agar je polysacharid, který je součástí buněčných stěn některých druhů mořských řas. Tento polysacharid je bezbarvý, bez chuti, bez zápachu a je nerozpustný ve studené vodě; rozpouští se v horké vodě, kdy dochází ke tvorbě koloidního roztoku, který zgelovává při teplotách okolo 30 až 40°C. Jeho výhodou oproti želatině je stálost při vyšších teplotách, teplota tání agarového gelu je okolo 85°C, kdežto želatina taje už při teplotách vyšších 27°C [1, 6, 13, 14].

Pektin je polysacharid, který se nachází v buněčných stěnách rostlin, a to především v ovoci (nejvíce v citrusových plodech a jablkách) a v menším množství také v kořenové zelenině. Je to bílá nebo světle šedá látka, bez výraznější vůně a chuti. Tvorba gelu u této želírující látky závisí jak na stupni esterifikace pektinu, dle které se dělí na vysokoesterifikované (esterifikace 55 až 75 %) a nízkoesterifikované (esterifikace od 15 do 44 %), tak také na koncentraci přítomného cukru a hodnotě pH roztoku [1, 6].

2.2.6 Rostlinné gummy

Technologickou funkcí rostlinných gum je schopnost zvyšovat viskozitu a tvorba gelu. Tyto gummy vznikají vysycháním rostlinných šťáv vytékajících z rostlinných pletiv [12].

2.2.7 Senzoricky aktivní suroviny v cukrovinkách

Důležitým faktorem, který ovlivňuje druh a jakost konzumované potraviny je senzorická jakost. Vliv na senzorickou jakost mají senzoricky aktivní látky obsažené v potravinách. Jedná se o látky, které působí na naše smysly a řadí se mezi ně látky vonné, chuťové, barviva a látky ovlivňující texturu potravin [18, 19].

Vůně, chuť, barva a textura jsou tedy důležitými senzorickými vlastnostmi potravin, které mívají pro konzumenta často větší význam než jiné podstatnější atributy (nutriční a fyzikální vlastnosti, chemické složení), jelikož je vnímá jako prvotní informaci. Z tohoto důvodu výrobci kladou důraz na senzorickou kvalitu potraviny a v rámci konkurenčního boje o zákazníky využívají při výrobě potravin i řadu aditivních látek [18, 19, 20].

Kromě již výše zmíněných sladidel se ke zlepšení senzorických vlastností potravin, a zejména cukrovinek, používají především barviva a aromatické látky, do kterých spadají látky vonné a chuťové. Jejich stručná charakteristika je shrnuta v následujících kapitolách.

2.2.7.1 Barviva

Barviva jsou látky, které udělují potravině barvu, kterou by bez jejich přítomnosti neměla a/nebo slouží k obnově barvy, která byla zeslabena nebo poškozena při příslušném technologickém procesu. Barva potravin je důležitou vlastností nejen z důvodu tvorby prvního dojmu, ale i z toho důvodu, že spotřebitelé mají spojené určité typy potravin s určitými barvami, kromě toho atraktivní barva také povzbuzuje sekreci žaludečních šťáv. Za barviva se nepovažují potraviny, chuťové a vonné látky a jejich složky, které mají sekundární barvicí účinek (kurkuma, šafrán, mletá paprika). Dle původu lze barviva rozdělit do tří skupin, na barviva přírodní, syntetická identická s přírodními a syntetická [6, 9, 12, 18, 21].

Přírodní barviva jsou látky, které mají nejen barvicí funkci, ale jsou to často zároveň také sloučeniny podstatné pro biochemické děje v živých organismech. Nejdůležitějšími skupinami jsou karotenoidy, flavonoidy, anthrachinony, betalainy a pyrollová barviva. K přírodním barvivům se často řadí také produkty získané z přírodních surovin při jejich zpracování, např. karamel a sladový extrakt obsahující melanoidiny a také měďnaté komplexy chlorofylů a chlorofylinů a anorganické pigmenty jako uhlíkatý vápenatý. Výhodou použití přírodních barviv je jejich většinou zdravotní nezávadnost, avšak oproti barvivům syntetickým jsou méně stabilní, jsou náchylné k mikrobiálnímu kažení a je zde možná také kontaminace nežádoucími toxickými látkami. Syntetická barviva identická s přírodními jsou strukturou totožná s přírodními, avšak vyráběny synteticky; podle současné legislativy však už takto označeny být nesmějí [9, 12, 18, 22].

Syntetická barviva se získávají z vysoce přečištěných ropných produktů (musí obsahovat alespoň 85 % čistého barviva) a kromě barvy nesmí mít vliv na žádné jiné senzorické vlastnosti potravin. Na rozdíl od barviv přírodních mají syntetická barviva většinou intenzivnější barvu, širší spektrum barev, snadnější aplikaci, nižší cenu a jsou především stabilnější. Na druhou stranu nadměrné používání těchto barviv může mít i negativní vliv na zdraví, zvláště dětí, u kterých mohou způsobit hyperaktivitu. Vzhledem k možným toxickým účinkům syntetických barviv jsou legislativou určeny jejich limity a druhy pro použití u potravin a také jsou určeny typy potravin, u kterých se mohou použít pouze určitá barviva anebo se nesmí přidávat vůbec žádná. Tabulka 2 uvádí seznam u nás povolených syntetických barviv [9, 12, 18, 21, 23].

Tabulka 2: Syntetická potravinářská barviva [9, 12, 18]

Název	Barva	Číslo E
tartrazin	citrónově žlutá	E102
chinolinová žluť	žlutá	E104
žluť SY	oranžová	E110
azorubin	modročervená	E122
amaranth	modročervená	E123
Ponceau 4R	červená	E124
erythrosin	červená	E127
červeň 2G	modročervená	E128
červeň Allura AC	červená	E129
patentní modř V	zelenomodrá	E131
indigotin	tmavě modrá	E132
brilantní modř	zelenomodrá	E133
zeleň S	zelená	E142
čerň BN	černá	E151
hněď FK	hnědá	E154

Tabulka 2: Syntetická potravinářská barviva – pokračování [9, 12, 18]

Název	Barva	Číslo E
hněd HT	hnědá	E155
litholrubin BK	červená	E180

V některých případech je naopak přirozená barva potravin nežádoucí a provádí se bělení. K tomuto procesu se používají tzv. bělidla, což jsou látky, které redukují nebo oxidují nežádoucí barviva na bezbarvé nebo méně intenzivně zbarvené. Redukující schopnosti se využívá u oxidu siřičitého a siřičitanů, naopak schopností oxidovat u sloučenin s aktivním kyslíkem a aktivním chlórem [18, 21].

2.2.7.2 Aromata

Aromaty se nazývají látky vonné a chuťové, tedy látky působící na čichové a/nebo na chuťové receptory. Tyto látky se používají k napodobení přírodních vůní a chutí v potravinách a lze je vyrobit z kvalitních přírodních materiálů (silic, destilátů, extraktů), dále z látek přírodně identických, které jsou z ekonomických důvodů vyráběny synteticky, nebo z látek syntetických, které se v přírodě nevyskytují. Některé rostlinné materiály, které jsou povoleny jako zdroj aromatických látek, však obsahují jako přirozené složky řadu závadných látek, jedná se např. o květy a plody bezu černého, které obsahují kyanovodík nebo toxický pulegon obsažený v nati máty peprné [12, 18, 21, 24].

Chuťové látky jsou obvykle polární, ve vodě rozpustné a netěkavé sloučeniny. Výsledný vjem je dán většinou kombinací základních chutí, tj. sladké, slané, kyselé a hořké. Na rozdíl od těchto čtyř základních chutí, jejichž vjemy vznikají na určitých specializovaných receptorech v ústní dutině jsme schopni vnímat i chutě, které jsou registrované celou ústní dutinou, jedná se o chuť umami, trpkou a pálivou [18].

Vonné látky jsou převážně málo polární nebo nepolární těkavé látky, jejichž počet v potravinách činí až 10 tisíc, avšak běžně jich bývá pouze několik set. Jedná se o látky, které lze nalézt v každé skupině organických sloučenin, ať už se jedná o samotné uhlovodíky nebo běžněji o sloučeniny s kyslíkem, dusíkem či sírou. Vonné látky lze rozdělit na látky primární a sekundární.

Primární vonné látky jsou přítomny v potravinách živočišného, rostlinného nebo jiného původu jako produkt sekundárního metabolismu; jsou tedy sekundárními metabolity produkovanými vnitrobuněčnými procesy, jejich kvalita a kvantita závisí na genetických dispozicích daného organismu. Významnými primárními vonnými látkami, zvláště v rostlinných materiálech, jsou terpeny, jejichž základní stavební jednotkou je isopren [18].

Druhu skupinou vonných látek jsou **vonné látky sekundární**, které vznikají enzymovými reakcemi (dozrávání, fermentace) z přirozené přítomných prekurzorů (sacharidů, bílkovin, lipidů, popř. dalších chemických složek) nebo neenzymovými reakcemi při zpracování surovin (typické aromatické látky pražené kávy a pečiva vznikají neenzymovými reakcemi během tepelného opracování), oxidací lipofilních složek apod. [18, 25].

Podrobnější charakteristika vonných látek v cukrovinkách je popsána v kapitole 2.4.

2.3 Technologie výroby nečokoládových cukrovinek

Jak už bylo zmíněno, nečokoládové cukrovinky se rozdělují na cukrovinky s vykrytalizovanou a nevykrytalizovanou sacharózou. U obou druhů cukrovinek je základem výroby příprava roztoku sacharózy a škrobového sirupu (tzv. cukrosirupový roztok). Principem

výroby obecně je odpaření vody z cukrosirupového roztoku až do dosažení požadované sušiny podle typu výrobku, příp. krystalizace (u výrobku s vykrystalizovanou sacharózou), formování vzniklé hmoty do požadovaného tvaru a vyhlazení.

Zda dojde ke vzniku krystalů, závisí na poměru těchto dvou složek. V případě, kdy se jedná o čistý roztok sacharózy, dochází ke krystalizaci při zahřívání roztoku nad teplotu 115°C. Přídavkem škrobového sirupu dochází ke zvyšování bodu varu roztoku, zabraňuje tedy krystalizaci a pomáhá tvorbě amorfního stavu hmoty. K zabránění krystalizace se používá také invertní cukr, který má nejen vyšší hygroskopicitu, ale také sladivost jak škrobový sirup [1, 26].

Poměr škrobového sirupu a cukru, který se používá při výrobě nečokoládových cukrovinek, bývá označován jako tzv. varný poměr. U kandytů se tento poměr pohybuje okolo 1 : 1 až 0,4 : 1 [1, 2, 4, 26].

Při odpařování cukrosirupových roztoků dochází ke zvyšování obsahu sušiny a zároveň i bodu varu. Teplota, při které dochází k přeměně roztoku na požadovanou hmotu, se nazývá stupeň sváření. Tato hodnota je závislá jak na složení roztoku, tak na konečném obsahu vody ve hmotě, druhu varného zařízení a hodnotě tlaku. Bod sváření u kandytů se za atmosférického tlaku pohybuje okolo teploty 160°C [1, 27].

2.4 Vonné látky v cukrovinkách

K aromatizaci potravin se vyrábí vonné látky v různých formách, z nichž nejběžnější jsou vonné látky tekuté, které mohou být čiré nebo emulzní. Dále se pak vyrábí vonné látky práškovité, především zapouzdřené, pastovité (tukové nebo na bázi ovocných dření) a vonné látky ve formě gelu. Výběr správného typu a formy vonné látky pro daný výrobek se určuje podle obsahu vody nebo tuku cukrovinky (hranice 10 %), podle teploty hmoty během přidávání této látky případně také s ohledem na další zahřívání [1].

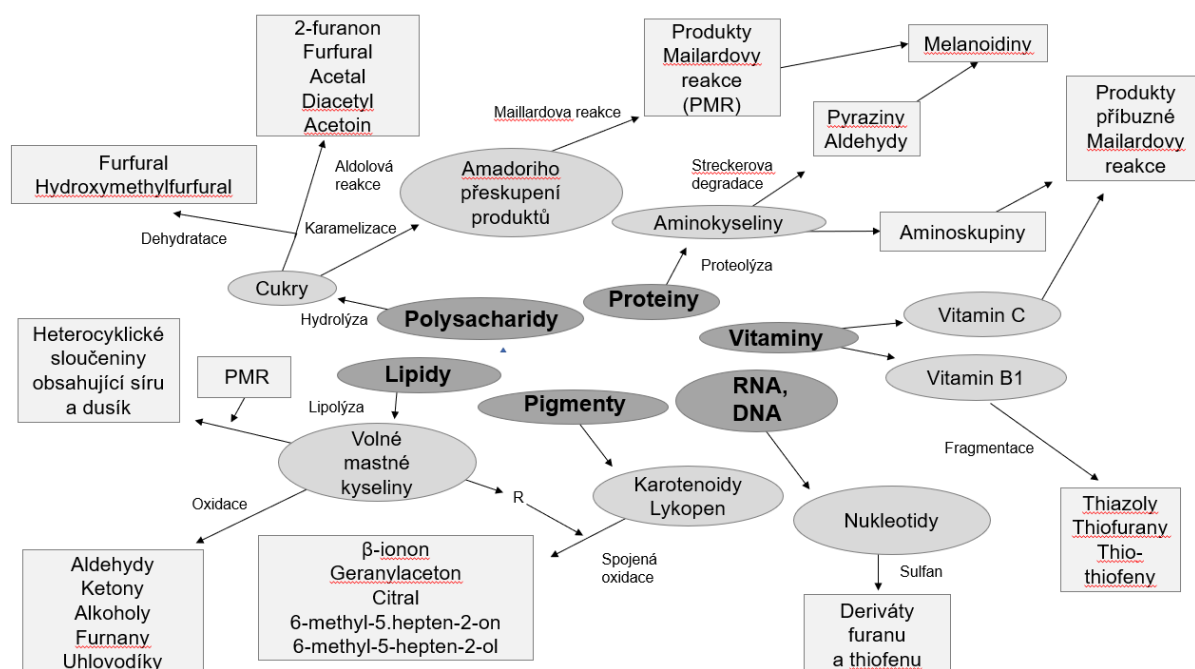
Cukrovinky s více jak 10 % tuku se aromatizují olejovými tekutými vonnými látkami nebo tukovými pastami. V případě krátkého zahřátí na teplotu kolem 100 °C působí tuk jako stabilizátor aroma, pokud je ale záhřev delší, je potřeba množství přidávané vonné látky zvýšit o 10 až 50 % [1].

Cukrovinky s převažujícím obsahem vody se aromatizují vodorozpustnými vonnými látkami, jestliže teplota při a po aromatizaci nepřesahuje teplotu 100 °C. Pokud se provádí po přídavku vonných látek další odpařování, je potřeba množství značně zvýšit, a to až o 100 % [1].

Nicméně nejen přidaná aroma jsou v cukrovinkách nositeli vůně. Vonné látky mohou obsahovat už základní vstupní suroviny, nebo mohou z těchto surovin vznikat během technologického procesu výroby.

Jak již bylo zmíněno v kapitole 2.2, surovin pro výrobu cukrovinek je široká škála, tudíž cukrovinky mohou obsahovat jak vonné látky obsažené v ovoci, ořeších, kakau, mléčných surovinách, medu, kávě, koření, tak látky vznikající z tzv. prekurzorů, kterými jsou sacharidy, aminokyseliny a tuky. Intenzita a kvalita vůně tedy nezávisí pouze na přítomných vonných látkách, ale i na těchto prekurzorech, se kterými vonné látky interagují. Tyto nevazebné interakce pak ovlivňují koncentrace vonných látek v plynné fázi [18, 28].

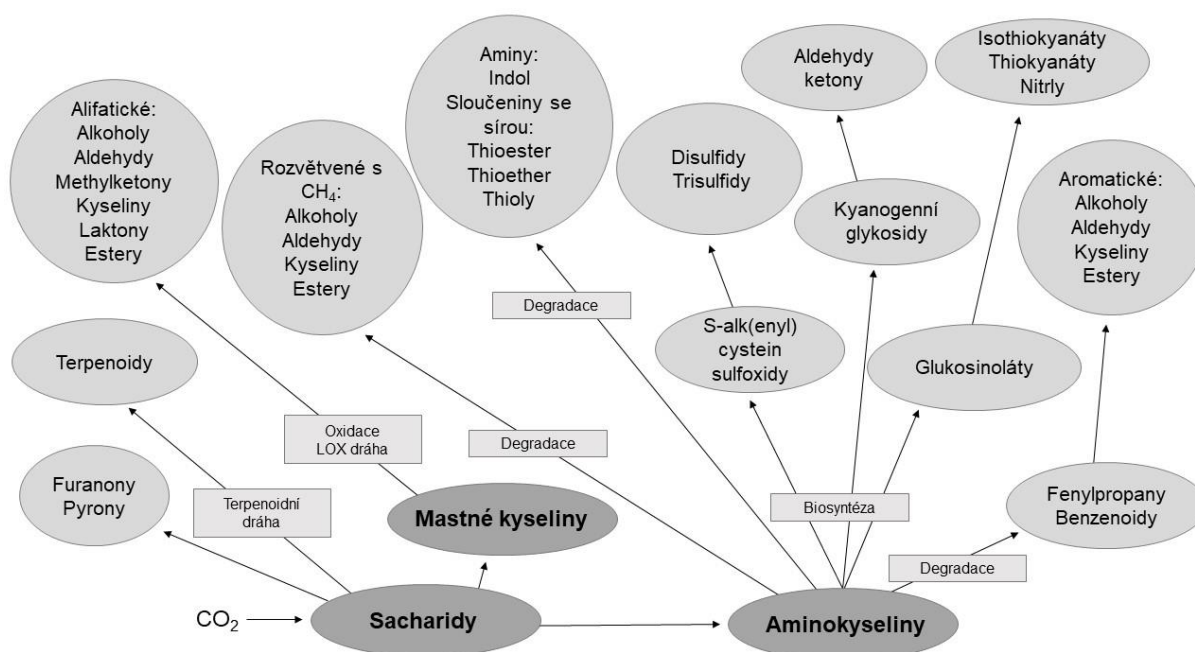
Podstatnou část hmoty nečokoládových cukrovinek tvoří sacharidy, které během zahřívání cukrosirupových roztoků (teploty nad 110 °C) podléhají inverzi, karamelizaci a Maillardově reakci, což jsou hlavní reakce pro tvorbu vonných látek v cukrovinkách. Vznik sekundárních vonných látek nejen ze sacharidů jako prekursorů, je zobrazen na obrázku 1 [1].



Obrázek 1.: Obecné schéma vzniku sekundárních vonných látek; PMR – produkty Maillardovy reakce

2.4.1 Vonné látky v ovoci

Jelikož v této práci byly analyzovány vzorky kandytů s ovocnou příchutí (konkrétně citronu, pomeranče, jahod a jablka) jsou dále zmíněny vonné látky v ovoci, a zvláště sloučeniny charakteristické pro uvedené druhy ovoce.



Obrázek 2: Vznik aromatických sloučenin v rostlinách; LOX – lipoxygenasa [32].

Vonné látky v ovocných a zeleninových pletivech jsou přítomny v poměrně nepatrných koncentracích, ale přesto dodávají charakteristické aroma a navíc často rozhodují spolu s dalšími látkami o jejich dietetické hodnotě. Vonné látky ovoce tvoří zejména estery nižších mastných kyselin, acyklických alkoholů a aldehydů. Schéma zobrazující vznik primárních vonných látek obecně v rostlinách je zobrazeno na obrázku 2 [18, 30, 31].

Aroma **jablek** je tvořeno více než 300 různými sloučeninami, z nichž nejdůležitější jsou C_5 kyseliny, alkoholy a estery. V závislosti na odrůdě převládají buď alkoholy, nebo estery. Přítomnými alkoholy v jablkách jsou např. linalool, butanol, hexanol a také (2*E*)-hex-2-enol a (3*Z*)-hex-3-enol, které jsou nositeli tzv. zeleného aroma jablek. Mezi další nositele tohoto aroma patří i aldehydy hexanal a (2*E*)-hex-2-enal. Z kyselin jsou významné kyseliny 3-methylmásečná a 2-methylmásečná, jejichž ethyl ester (ethyl-2-methylbutyrát) je klíčovou složkou aroma jablek. Důležitou vonnou látkou je také β -damascenon a příbuzné sloučeniny, dále 1-okten-3-on mající houbové aroma, methional s vůní vařených brambor a dimethyldisulfid se sirnou vůní. Velkou část aroma jablek tvoří také estery, především butyráty a acetáty (butylacetát, 2-methylbutylacetát, ethylbutanoát apod.), které při zahřívání jablek podléhají hydrolýze a ze vznikajících hydroxykyselin vznikají příslušné laktony [18, 29].

Aroma **jahod** tvoří více než 400 různých sloučenin, avšak význam většiny z nich není zcela prokázán. Nositeli aroma jsou zde jako u každé ovocné a zelené vůně řady esterů a aldehydů; větší význam má furaneol (jahodový furanon) a methylether mesifuran. Při zrání jahod dochází ke snižování obsahu furaneolu a současně nárůstu etheru, který má vůni vína typu sherry. Kromě těchto dvou sloučenin je jahodové aroma dále charakterizováno jejich směsí s (3*Z*)-hex-3-enalem, methyl- a ethylbutyrátem, ethyl-2-methylbutyrátu, ethyl-3-methylbutyrátu, biacetylu, octové a másečné kyseliny. Přírodní jahodová aromata jsou ale nestálá a tedy např. pro kandytové výrobky nepoužitelná, proto se používají aromata, jejichž bod varu je vyšší než 150 °C, jedná se o sloučeniny jako ethylkapronát, ethylbenzoát, ethylcinnamát, vanilin, nerol, p-hydroxyfenylbutanon, některé kyseliny např. 2-methyl-2-cis-pentenová kyselina a také různé silice (růžová, irisová, citronová, koňaková aj.) [1, 18].

Aroma citrusového ovoce tvoří několik desítek až několik set sloučenin, z nichž hlavní složkou je (*R*)-limonen, který určuje základní sensorický charakter silic, ale jeho přítomnost není nezbytná. Dalšími složkami vůně citrusů jsou nasycené aldehydy C_8 až C_{12} , citral a nenasycený aldehyd (2*E*)-dec-2-enal [18].

Aroma **pomeranče** a grapefruitu je od vůně ostatních citrusů rozpoznatelné díky přítomnosti (+)-valencenu. K pomerančové vůni přispívají ale i některé aldehydy, jako např. oktanal, nonanal, dekanal, β -sinensal, citral a vanillin, dále i ketony pent-1-en-3-on a β -jonon. Vůně čerstvých pomerančů je ale tvořena i některými ethylestery (ethylpropanoát, ethylbutanoát, nerylacetát apod.), laktony (zejména vinný lakton), alkoholy (3-methylbutanol, (+)-linalool, (+)- α -terpineol) a také uhlovodíky, jako např. β -karyofyllen s kořenovou vůní, α -pinen a myrcen. Při oxidaci limonenu dochází ke vzniku karvonu a karveolu, které tvoří terpenový přípach silic a džusů. Při oxidaci valencenu vznikají produkty, které udělují pomerančovým džusům přípach po grapefruitu [18].

U **citronů** jsou důležitými nositeli vůně β -pinen, (-)-terpinen-4-ol a citronello, jejichž vůně připomíná citronovou kůru. Součástí citronové vůně je α -bergamoten a důležitý je také obsah citralu, některých alkanalů, esterů (zvláště geranyl- a nerylacetátu) a alkoholu α -bisabololu. Hlavními složkami citronových silic je kromě limonenu a citronellolu také hexanol, α -terpineol, 3-cis-hexenol, methylbutenoly a řada dalších. Některé odrůdy citronu poskytují silice s poměrně hrubou vůní. Ta se zjemňuje přidávkou malého množství pomerančové silice.

Naopak citronové silice s jemnou vůní se někdy upravují přidáním lisované limetové silice nebo čistým citralem [1, 18].

2.4.2 Legislativa v oblasti vonných látek v potravinách

Legislativně je používání vonných látek v potravinách ošetřeno Nařízením č. 1334/2008/ES a příslušnými prováděcími přílohami (793/2012/ES a 872/2012/ES). Toto nařízení definuje aromatické látky jako chemické látky, které zahrnují aromatické látky získané chemickou syntézou anebo izolované za použití chemických procesů a přírodní aromatické látky. Aromatické přípravky jsou zde definovány jako látky určené k aromatizaci, jiné než definované chemické látky, získané z materiálů rostlinného, živočišného nebo mikrobiologického původu vhodnými fyzikálními, enzymatickými nebo mikrobiologickými procesy, buď v surovém stavu materiálu, nebo po zpracování za účelem lidské spotřeby [33].

Součástí tohoto nařízení je seznam povolených vonných látek v potravinářství, jejich požadovaná čistota a popřípadě také jejich omezení. Limitované je např. množství menthofuranu (který se používá v cukrovinkách obsahujících mátu a cukrovinkách na osvěžení dechu) vzhledem k jeho možným hepatotoxickým a pulmotoxickým účinkům, nebo také pro své možné hepatotoxické a neurotoxické vlastnosti pulegon. Dále je limitováno množství estragolu, kyseliny kyanovodíkové, methyleugenolu, quassinu, safrolu, teukrinu A, thujonu a kumarinu [18, 33, 34].

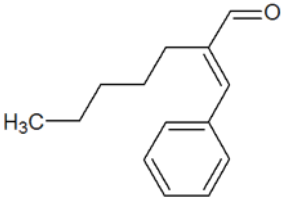
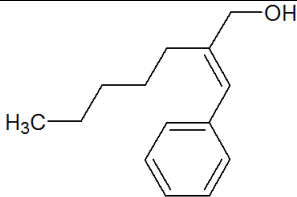
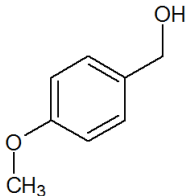
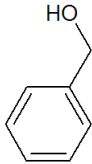
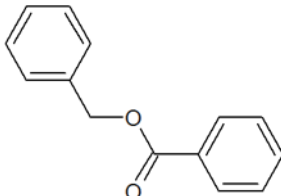
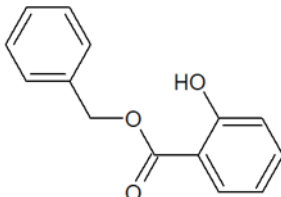
K aromatizaci potravin se ale používají i takové látky, které byly označeny jako potenciálně alergenní, ale v rámci kosmetické legislativy (Nařízení č. 1223/2009/ES). Jedná se celkově o 26 substancí (viz následující kapitola 2.4.3), z nichž 24 je chemicky definovaných a 2 jsou mechové extrakty. Z těchto 26 vonných látek je potravinářskou legislativou omezeno pouze použití kumarinu, jehož nadměrné množství může způsobit hepatotoxické, nefrotoxické a antikoagulační problémy [18, 36, 37].

2.4.3 Potenciálně alergenní vonné látky

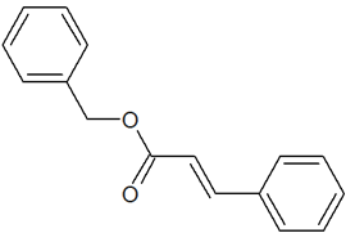
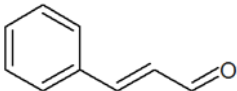
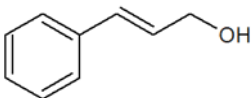
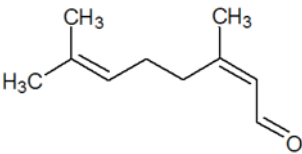
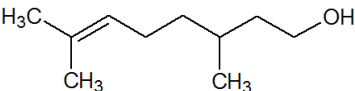
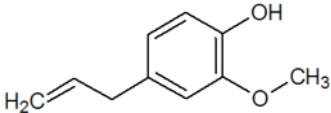
Jedním z cílů této práce je stanovení aromaticky aktivních látek, které jsou dle kosmetické legislativy označeny jako potenciálně alergenní. V této kapitole (viz tabulka 3) je uveden seznam těchto látek, jejich základní charakteristika a použití. Jejich názvy jsou uvedeny tak, jak se nejčastěji vyskytují na obalech výrobku [16, 36–40].

Na kosmetických výrobcích musí být jejich přítomnost vyznačena, pokud koncentrace překračuje $10 \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ u přípravků, které se neoplachují a $100 \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ u přípravků, které se oplachují. V případě potravin tyto látky zatím nemusí být jmenovitě uvedeny na obalech, přesto je sledování jejich obsahu vysoce žádoucí vzhledem k možnému riziku, které představují.

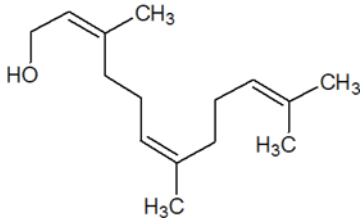
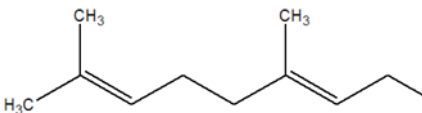
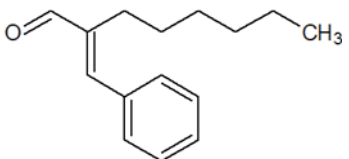
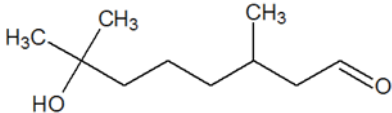
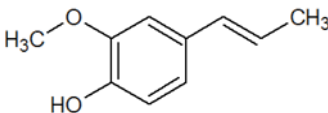
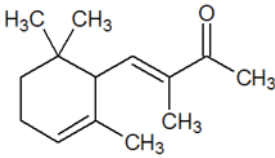
Tabulka 3: Vlastnosti alergenních vonných látek [16, 36–40]

Název [CAS číslo]	Struktura	Vlastnosti a použití
α -Amylcinnamal [122-40-7]		Světle žlutá kapalina, která se běžně vyskytuje, zejména v silicích květů (jasmín). Používá se v potravinářství (jasmínový čaj), v kosmetice, v čistících prostředcích aj.
Amylcinnamyl alkohol [101-85-9]		Bezbarvá kapalina s vůní broskví, banánů a hrušek s jasmínovou chutí. Používá se v potravinářství (čaje, cukrovinky, nápoje) a v kosmetice.
Anýz alkohol [105-13-5]		Bílá až lehce nažloutlá kapalina, která se vyskytuje v anýzu, hyacintu, medu, vanilce a je také součástí vůně květů jabloní, meruněk, banánu a řady dalších. Používá se zejména v kosmetice, v potravinářství, ve vonných svíčkách apod.
Benzyl alkohol [100-51-6]		Bezbarvá až nažloutlá olejovitá kapalina s mandlově-ovocnou vůní. Vyskytuje se v jasmínu, v pomerančových květech aj. Má anestetické, antiseptické a antimikrobiální účinky. Používá se v potravinářství (nápoje, bonbony nebo sirupy proti kašli), jako rozpouštědlo v léčivech, kosmetice, ale také ve fotografickém průmyslu.
Benzyl ester kyseliny benzoové [120-51-4]		Bezbarvá viskózní kapalina nebo krystaly s balzamicko-mandlovou vůní. Používá se v potravinářství (stabilizátor syntetických chutí), v medicíně (léčba svrabu), v kosmetice a jako plastifikátor v průmyslu.
Benzyl ester kyseliny salicylové [118-58-1]		Bezbarvá kapalina s příjemným aroma, která se vyskytuje v hřebíčku, karafiátu aj. Používá se jako rozpouštědlo, ředidlo a fixativum vonných látek především v kosmetice. Pro svůj antipyretický a analgetický účinek se používá také při výrobě léčiv.

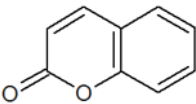
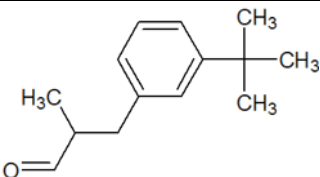
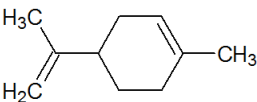
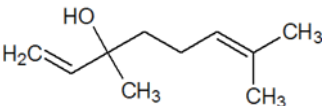
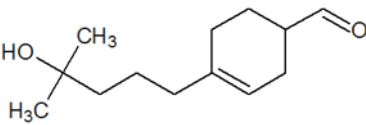
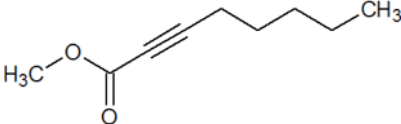
Tabulka 3: Vlastnosti alergenních vonných látek – pokračování [16, 36–40]

Název [CAS číslo]	Struktura	Vlastnosti a použití
Benzyl ester kyseliny skořicové [103-41-3]		Bílá krystalická látka se sladkou vůní květů a plodů třešní. Používá se v kosmetickém průmyslu, je součástí peruánského a toluánského balzámu a používá se také v potravinářství jako ochucovadlo s balsamickou příchutí.
Cinnamal [104-55-2]		Žlutá olejovitá tekutina, která je běžnou součástí mnoha éterických olejů např.: levandulového, hyacintového a dalších. Ve větším množství se vyskytuje v kůře skořicovníku a v kassiovém oleji. Používá se v potravinářství (koření, žvýkačky), v kosmetice, v čistících prostředcích a dalších.
Cinnamyl alkohol [104-54-1]		Světle žlutá kapalina nebo bílá pevná látka s velmi příjemnou květinovou až skořicovou vůní a hořkou chutí. Je součástí fialkové a hyacintové vůně. Používá se v kosmetice a v potravinářství (nápoje, žvýkačky).
Citral [5392-40-5]		Nažloutlá olejovitá kapalina s citrónovou vůní. Je obsažen v mnoha rostlinách, především v citrusových plodech. Používá se v potravinářství (čajové směsi, ochucovadlo), v kosmetice, v syntéze retinolu a v insekticidních atraktantech.
Citronellol [106-22-9]		Bezbarvá olejovitá kapalina s vůní růže a hořkou chutí. Používá se v potravinářství (čajové směsi, exotické nápoje), v kosmetice a v insekticidních atraktantech a pesticidech.
Eugenol [97-53-0]		Bezbarvá na světle a vzduchu hnědnoucí kapalina s vůní hřebíčku a karafiátu. Má antiseptické, antibakteriální a bolest tišící účinky. Používá se jako ochucovadlo v potravinářství (hřebíčková a kořeněná příchut') a v kosmetice.

Tabulka 3: Vlastnosti alergenních vonných látek – pokračování [16, 36–40]

Název [CAS číslo]	Struktura	Vlastnosti a použití
Farnesol [4602-84-0]		Bezbarvá kapalina se sladkou květinovou vůní. Je přítomen ve květech pomerančovníku, růže, jasmínu, konvalinek nebo lípy. Má bakteriostatické účinky. Používá se v potravinářství (ochucovadlo, cigarety), v kosmetice a v insekticidních atraktantech.
Geraniol [106-24-1]		Bezbarvá až světle žlutá olejovitá kapalina s vůní růže. Vyskytuje se v mnoha rostlinách např. v růžích, levanduli, jasmínu aj. Má antiseptický účinek a používá se v potravinářství, kosmetice a v insekticidních atraktantech.
Hexylcinnamal [101-85-0]		Žlutá tekutina s květinovou jasmínovou vůní. Používá se v potravinářství (ochucovadlo), v kosmetice, čistících prostředcích a ke korekci vůni detergentů.
Hydroxycitronellal [107-75-5]		Je to bezbarvá až světle žlutá viskózní kapalina s intenzivní nasládlou vůní květin (lípy, konvalinky). Používá se v potravinářství, v kosmetice, insekticidech a v čistících prostředcích.
Isoeugenol [97-54-1]		Bezbarvá až světle žlutá olejovitá tekutina s vůní karafiátu. Vyskytuje se v mnoha rostlinách (skořice, švestky) a éterických olejích (např. hřebíčkovém). Má antiseptické a analgetické účinky. Používá se v potravinářství (kořenící směsi), v kosmetice a ve farmacii, ale také při výrobě vanilinu, UV absorberů, plastů apod.
Isomethyl ionon [127-51-5]		Syntetická bezbarvá kapalina s květinovou vůní (kosatec, fialka). Používá se v potravinářství a jako součást vůně mnoha kosmetických výrobků.

Tabulka 3: Vlastnosti alergenních vonných látek – pokračování [16, 36–40]

Název [CAS číslo]	Struktura	Vlastnosti a použití
Kumarin [91-64-5]		Lesklé krystalky s vůní tonkových bobů, lučního sena a vanilky. Používá se v potravinářství (alkoholické nápoje, ochucovadlo), v kosmetice a pro své antikoagulační vlastnosti našel své uplatnění také v lékařství (Warfarin) a jako deratizační jed pro hlodavce.
Lilial [80-54-6]		Syntetická bezbarvá nebo lehce nažloutlá olejovitá tekutina s květinovou vůní. Používá se zejména v kosmetice a v čisticích prostředcích.
Limonen [5989-27-5]		Je to bezbarvá kapalina se svěží citrusovou vůní, která na vzduchu snadno oxiduje (kmínové aroma). V přírodě se běžně vyskytuje v citrusových plodech, v pepři, muškátovém oříšku a v tea tree oleji. Široké využití, vyskytuje se v mnoha výrobcích s vůní citrusových plodů.
Linalool [78-70-6]		Bezbarvá kapalina s květinovou vůní (konvalinky). V přírodě se vyskytuje v mnoha květech a koření. Má analgetické a protizánětlivé účinky. Používá se v potravinářství, kosmetice a také jako insekticidní prostředek.
Lylal [31906-04-4]		Syntetická olejovitá tekutina s se sladkou květinovou vůní (lilie, konvalinky) a dlouhou dobou působení. Používá se zejména v kosmetice a čisticích prostředcích.
Methyl-2-oktát [111-12-6]		Syntetická bezbarvá až světle žlutá tekutina s vůní listů okurků. Používá se ve velké řadě kosmetických výrobků.

2.5 Možnosti stanovení vonných látek

Aromaticky aktivní (vonné) látky lze vzhledem k jejich nízkým koncentracím v potravinách poměrně složitě stanovit. Tyto látky lze nalézt v podstatě ve všech skupinách organických sloučenin a ve vzorku můžeme tedy přistupovat k jejich identifikaci dvěma způsoby: buď nás

zajímají veškeré přítomné těkavé složky, nebo chceme stanovit určité jednotlivé sloučeniny. V případě prvního přístupu jsou těkavé látky ze vzorku nejprve izolovány, poté separovány, detekovány a na závěr identifikovány. Nejběžnější metodou tohoto postupu bývá plynová chromatografie. Pokud ale stanovujeme sloučeniny, jejichž přítomnost ve vzorku je předem předpokládána (např. aldehydy, těkavé kyseliny, nižší alkoholy apod.) je možné použít metody konvenční jako např. titraci, spektrometrii, pyknometrické stanovení apod. Od použití těchto metod se ale z důvodu jejich nespecifičnosti a menší přesnosti v poslední době ustupuje [41, 42].

2.5.1 Izolace vonných látek

Izolace těkavých látek ze vzorků může být provedena destilací nebo extrakcí, popřípadě kombinací obou technik.

2.5.1.1 Destilační metody

Destilace je separační technika, při které dochází k oddělení kapalné složky z jejich směsí na základě rozdílných bodů varů. Směs je zahřívána k varu, dochází k vyrovnání tlaku par látky a vnějšího tlaku, vzniklé páry se odvádějí a oddělené kondenzují. Látky těkavější, s vyšším tlakem par, se ze směsi oddělují nejdříve [43, 44].

Destilací za sníženého tlaku bývají obvykle separovány látky s vyšším bodem varu, které by se při destilaci za normálního tlaku rozkládaly nebo by je nebylo možné vůbec predestilovat. Pro izolaci těkavých látek ve vodě nerozpustných je možné požívat **destilaci vodní párou**; výhodou této techniky je její jednoduché provedení a používá se právě často v případě, kdy nelze použít přímá headspace analýza, kvůli jejich vazbě na strukturu matrice nebo kvůli vysokému rozdělovacímu koeficientu mezi vzorkem a plynnou fází. Nevýhodou destilace vodní párou je možná tepelná degradace některých složek vzhledem k použité zvýšené teplotě (není tedy vhodná pro analýzu tepelně nestabilních substancí a látek citlivých na oxidaci). Spojením destilace vodní párou a kontinuální extrakce vznikla metoda Likens-Nickersonova nebo též **simultánní destilace-extrakce**. Výhodou této techniky je možnost provedení izolace a zakoncentrování v jednom kroku a také úspora použitých kapalin díky jejich recirkulaci [23, 43, 44, 45].

2.5.1.2 Extrakční metody

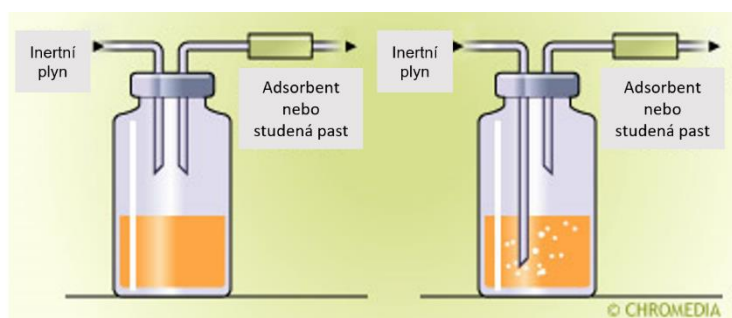
Extrakce je proces, při kterém je převáděna složka směsi fázovým rozhraním z jedné fáze (plynné, kapalné, pevné) do druhé fáze (kapalné, pevné). Její dělicí schopnost je podmíněna selektivní rozpustností, rozdílnými rozdělovacími koeficienty látek v rozpouštědle [44, 46].

Nejjednodušší extrakce je **přímá extrakce rozpouštědlem**, kterým lze extrahovat těkavé látky jak z pevných maticí, tak z kapalin. Obecně platí pro volbu rozpouštědla hrubý odhad pocházející z Liebigova pravidla „Podobné se rozpouští v podobném.“; pro přesnější výběr se ale typ rozpouštědla určuje dle parametru rozpustnosti δ . Dalšími důležitými aspekty rozpouštědla jsou polarita, teplota varu a viskozita. Pro extrakci tuhé látky kapalinou je nejčastěji používán Soxhletův extraktor nebo extraktor podle Twisselmana. Extrakce z kapaliny do kapaliny umožňuje mnoho rychlých a selektivních dělení různých druhů látek v širokém rozmezí koncentrací. Nevýhodou tohoto způsobu je časová náročnost (k zakoncentrování extraktu se provádí následná destilace) a dále také fakt, že dochází k extrakci i netěkavých složek (vosky, tuky) a možné interferenci rozpouštědla s těkavými látkami během analýzy plynovou chromatografií [44, 47].

Další metodou extrakce je **extrakce nadkritickou tekutinou** (Supercritical fluid extraction – SFE), u které je k extrakci pevného vzorku používána nadkritická (superkritická) tekutina; běžně oxid uhličitý, jehož kritická teplota má hodnotu 31°C a tlak 7149 kPa. Oproti

klasické extrakci kapalinou má SFE řadu výhod, je rychlejší, její selektivita může být snadno řízena, poskytuje čistší extrakty, vyžaduje méně rozpouštědla a další kladnou vlastností je také možnost on-line spojení s plynovou chromatografií (GC), vysokoúčinnou kapalinovou chromatografií (HPLC), infračervenou spektroskopií s Fourierovou transformací (FTIR) a dalšími analytickými metodami. Ve srovnání s headspace technikami má také značnou výhodu, jelikož umožňuje izolaci i méně těkavých látek nebo látek vázaných v matrici. Jelikož se SFE provádí většinou za nízkých teplot, je to vhodná metoda také pro stanovení tepelně labilních látek. Nevýhodou je omezená schopnost extrakce polárních látek a instrumentální náročnost [44, 46, 48, 49].

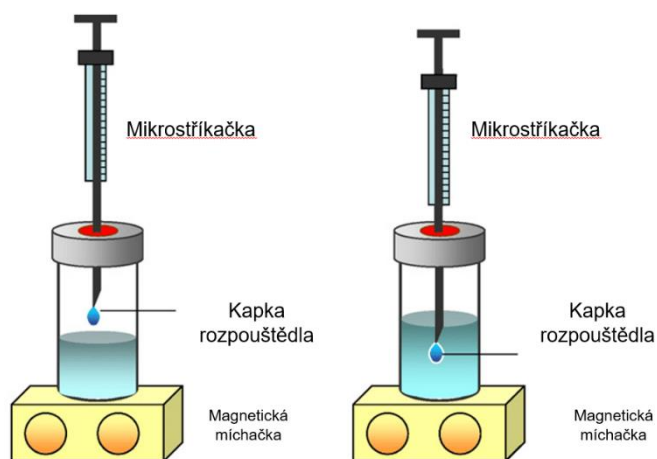
Těkavé látky lze ze vzorku izolovat také šetrnou extrakcí plynem tzv. **headspace** (HS) technikou. Při HS analýze dochází k ustanovení rovnováhy mezi těkavými látkami obsaženými ve vzorku a v plynné fázi nad vzorkem v plynotěsné uzavřené vialce. Headspace analýza může být provedena dvěma způsoby. Pokud je analyzován vzorek plynu nad pevnou (kapalnou) fází ve statickém uzavřeném systému (vialka uzavřená septem), jedná se o tzv. **statickou HS**. Statická HS je užitečná pro analýzu velmi těkavých látek. Pro efektivnější uvolnění těchto látek ze vzorku do plynného prostoru lze použít zvýšenou teplotu, ekvilibraci nebo pomocí vysolení zvýšit iontovou sílu vzorku. Zvýšení teploty ale může zároveň vést ke tvorbě artefaktů a může také zkreslit kvantitativní složení látek. Druhým typem headspace metody je **dynamická headspace**, u které dochází k vymývání těkavých látek proudem inertního plynu, nejčastěji heliem, který je vháněn do prostoru nad vzorkem a dále prochází sorpční trubicí, kde se těkavé látky zachycují. Ze sorpční trubice jsou poté látky převedeny na chromatografickou kolonu. Jelikož ale může docházet k rozdílným průtokům nosného plynu skrz sorpční trubici, bývá před chromatografickou kolonou předřazena „studená past“, díky které dochází k zaostření zón. Dynamická headspace umožňuje analýzy s minimem tvorby artefaktů vzniklých během odběrů vzorků. Při purge and trap analýze inertní plyn prochází přímo vzorkem (viz obrázek 3) [42, 44, 49, 51].



Obrázek 3: Dynamická headspace a purge and trap analýza [50]

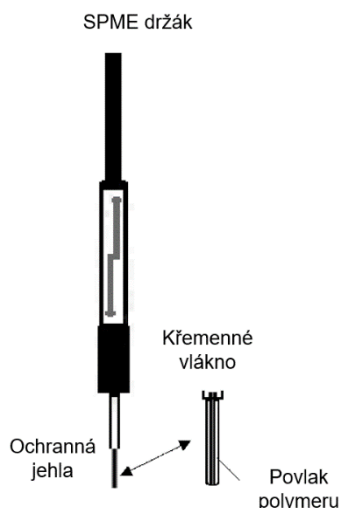
Dalším typem extrakce je **extrakce na pevné fázi** (Solid phase extraction – SPE), ta je ale oproti předešlým způsobům používána méně. Tato metoda bývá využívána především k zakoncentrování a někdy také k přečištění stanovovaných analytů. Díky své jednoduchosti a snadnému použití ale našla uplatnění v podobě jednorázových minikolonek. Jedná se o kolony, které jsou plněny sorbenty o různých velikostech částic. SPE se využívá především v analýze vody na stanovení pesticidů a jiných kontaminantů životního prostředí [42, 51].

Miniaturizací tradiční extrakce kapalinou vznikla metoda **mikroextrakce na jedné kapce** (Single drop microextraction – SDME). SDME je proces založený na extrakci analytu z plynného (headspace SDME – HS-SDME) či kapalného (Direct Immersion SDME – DI-SDME) vzorku do velmi malého objemu vhodného organického rozpouštědla, které je často v podobě pouze jedné kapky vsunuto do vialky pomocí mikrostříkačky (viz obrázek 4). Po extrakci je kapka nasáta zpět do jehly mikrostříkačky a následuje přímé zavedení do injektoru plynového chromatografu. Extrakci podporuje míchání vzorku, to ale v režimu DI-SDME (kdy je kapka rozpouštědla vytvořena přímo ve vzorku) vykazuje možné nebezpečí vzhledem k nestabilitě vytvořené kapky. Výhodou SDME metody je minimální spotřeba rozpouštědel. HS-SDME pracuje stejným způsobem jako níže uvedená HS-SPME, jen s tím rozdílem, že křemenné vlákno je zde nahrazeno mikrokapičkou. Výhodou SDME oproti SPME je širší výběr rozpouštědel než výběr komerčně dostupných SPME vláken, která jsou navíc často několikanásobně dražší a především u nich může docházet ke vzniku paměťového efektu (u SDME tento efekt není, jelikož je používána vždy nová kapka rozpouštědla). Nevýhodou HS-SDME je riziko možného odpařování kapky rozpouštědla během zakoncentrování headspace, kdy je nutné zvýšení teploty [23, 49, 52, 53].



Obrázek 4: HS-SDME a DI-SDME [54]

Jednou z prvních úspěšně používaných mikroextrakčních technik je **mikroextrakce na pevné fázi** (Solid phase microextraction – SPME), aplikovaná v této práci, je založena na sorpci těkavých látek na vlákno potažené sorbentem, a to buď přímo ve vzorku (DI-SPME) nebo v prostoru nad vzorkem (HS-SPME). Nejdůležitější součástí této metody je křemenné vlákno, které je pokryto polymerem v délce 1 nebo 2 cm (viz obrázek 5). Vlákno je umístěno uvnitř duté ocelové jehly, která ho chrání před mechanickým poškozením. Po dosažení sorpční rovnováhy, která závisí jak na koncentraci analytu ve vzorku, tak na typu a tloušťce polymeru, je vlákno vsunuto zpět do jehly, která dále směřuje do injektoru plynového chromatografu, kde je analyt tepelně desorbován a nesen na kolonu. Doba extrakce se řídí časem potřebným pro extrakci dostatečné koncentrace analytu s nejvyšší distribuční konstantou, která obecně zpravidla vzrůstá s molekulovou hmotností a bodem varu analytu. Výhodou této metody je, že není potřeba žádných rozpouštědel a její jednoduchost provedení, jelikož není potřeba žádná úprava vzorku. Na druhou stranu nevýhodou je křehkost vláken a také možnost vzniku kompetitivní sorpce [23,42,49].



Obrázek 5: SPME vlákno [55]

2.5.2 Plynová chromatografie

K separaci vonných látek se nejčastěji používá plynová chromatografie (Gas chromatography – GC). Tato metoda se vyznačuje jednoduchým a rychlým provedením analýzy, účinnou separací látek a malým množstvím vzorku potřebného k analýze. U GC je mobilní fází nosný plyn (nejčastěji dusík, helium, vodík) a stacionární fáze se nachází v koloně, která může být náplňová nebo kapilární. U náplňových kolon se nachází stacionární fáze ve formě pevných sorbentů (silikagel, aktivní uhlí, oxid hlinitý apod.) nebo kapaliny na nosičích (nejčastěji na bázi křemelinu např. oxid křemičitý). Kapilární kolony, které v současné době dominují, využívají jako nosiče stacionární fáze své vnitřní stěny [17, 23, 46].

Princip separace látek pomocí GC je následující: na začátku dochází k odpařování vzorku v temperovaném dávkovacím zařízení (injektoru), vzniklé páry vzorku jsou unášeny nosným plynem (který přichází z tlakové láhve přes redukční ventil) do kolony (která je umístěna v termostatu), kde se na začátku sorbují ve stacionární fázi a poté desorbují čerstvým nosným plynem. Složky opouštějící kolonu indikuje detektor. Signál detektoru se vyhodnocuje a z jeho časového průběhu (chromatogramu) se určí druh a kvantitativní zastoupení složek [23, 46].

Vzhledem k nutnosti působení vysokých teplot, potřebných pro přeměnu analytů v plyny, lze pomocí GC separovat pouze tepelně stálé a nízkomolekulární (relativní molekulová hmotnost menší než 1000) látky. Obecně lze tuto metodu použít k separaci plynů, většiny nedisociovatelných kapalin a pevných organických molekul a mnoha organokovových látek. Složitější příprava vzorků je potřeba při stanovování látek netěkavých nebo méně těkavých, kdy dochází k převedení těchto analytů na jejich těkavější deriváty tzv. derivatizací [23, 46].

2.5.3 Detektory používané při stanovení vonných látek

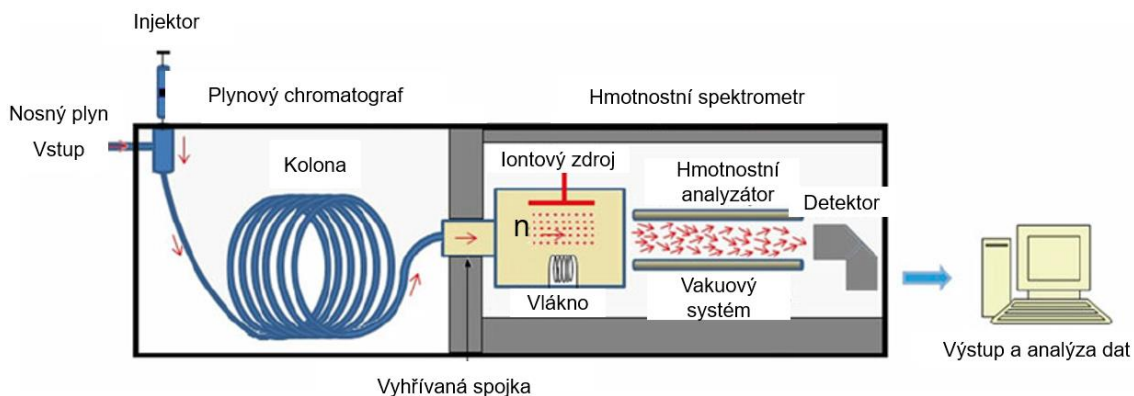
Detektor reaguje na přítomné analyty vycházející spolu s nosným plynem z kolony a vysílá signál, zpravidla elektrický, jenž je zaznamenáván v závislosti na čase (chromatogram). Je sledována taková vlastnost plynu, která závisí na druhu a koncentraci složek. Detektor musí mít dostatečnou citlivost (nízké detekční limity) a jeho odezva by měla být lineární funkcí obsahu analytu. Teplota detektoru by měla být vyšší než je teplota plynů vycházejících z kolony, aby se zabránilo kondenzaci látek na stěnách detektoru. GC se vyznačuje jak největším množstvím možných detektorů, tak také detektory s největší citlivostí a největší selektivitou mezi všemi separačními metodami [23, 44, 46].

V plynové chromatografii se používá několik typů detektorů, jejich volba závisí na vlastnostech měřených látek. Obvykle se používají detektory: plamenový ionizační (FID), tepelně-vodivostní (TCD), detektor elektronového záchytu (ECD), plamenový fotometrický (FPD) a jeho pulsní model (PFPD), fotoionizační (PID), dusíko-fosforový (NPD) a elektrolytický vodivostní. V případě olfaktometrického detektoru může být detektorem i člověk, tedy proškolená osoba – hodnotitel, který kromě kvalitativního a kvantitativního stanovení může popsat i vůni analytů [23, 56].

Velký význam má spojení plynového chromatografu s hmotnostním spektrometrem (MS). Tato tandemová analytická metoda je v současnosti běžná a to především z toho důvodu, že se jedná o kombinaci vysoké separační schopnosti plynové chromatografie s citlivou detekcí a spolehlivou identifikací cílových látek pomocí MS. Byla aplikována i v této práci [46, 57].

Nosný plyn s analytem vycházející z kolony plynového chromatografu (především se v tomto spojení používají kapilární kolony) se zavádí přímo do iontového zdroje ve vakuu, kde vakuový systém odstraní přebytečný nosný plyn. V iontovém zdroji dochází k převezení neutrálních molekul analytu na nabitě částice, které jsou dále separovány v hmotnostním analyzátoru dle podílu jejich hmotnosti a náboje. Fragmenty analytu opouštějící analyzátor přistupují k detektoru. Vycházející záznam z MS poskytne pro každý analyt (pík v chromatogramu) hmotnostní spektrum, které se porovnává se spektry tabelovanými v knihovně a lze tak s velkou pravděpodobností tento analyt identifikovat. Schéma GC-MS je zobrazeno na obrázku 6 [46, 57, 58].

U GC-MS se nejběžněji používá ionizace elektronová (EI) a chemická (CI), nevýhodou CI je ale nemožnost tvorby knihovny spekter. Jako analyzátoři se v tomto spojení používají kvadrupól (Q), iontová past (IT), průletový analyzátor (TOF) a trojitý kvadrupól (QqQ) [44, 58].



Obrázek 6: Schéma GC-MS [59]

2.6 Možnosti senzorického hodnocení cukrovinek

Senzorická analýza je vědecká disciplína používaná k vyvolání, měření a analyzování reakcí těch charakteristik potravin a dalších materiálů, které jsou vnímány zrakovým, čichovým, chuťovým, sluchovým a hmatovým smyslem. Jakožto multidisciplinární věda spojuje obory, jako jsou psychologie, sociologie, biologie, fyziologie nebo chemie. Velký význam má tato disciplína také pro výrobce, jelikož lze díky ní sledovat a optimalizovat kvalitu produktu a také lze posuzovat, jak je daný produkt přijímán zákazníkem [23, 59].

V následujících kapitolách je stručně popsán princip, provedení a hlavní metody senzorické analýzy použité i v experimentální části této práce.

2.6.1 Podmínky pro senzorickou analýzu

Podmínky pro senzorické hodnocení se volí takové, aby bylo zajištěno objektivní, přesné a reprodukovatelné měření. Tyto podmínky jsou určeny mezinárodními normami, kterými je definováno vybavení místnosti, způsob přípravy a předkládání vzorků. Optimálními podmínkami se rozumí takové, při nichž jsou co nejvíce eliminovány rušivé vlivy (některé z nich jsou uvedeny v tabulce 4) [59, 60].

Tabulka 4: Optimální podmínky pro senzorickou analýzu

Optimalizovaný faktor	Optimální podmínky pro hodnocení
Hladina zvuku	kolem 40 dB, izolace dveří a oken
Teplota	21 až 23 °C nejlépe klimatizace
Vlhkost vzduchu	40 až 70 %, v zimě vlhčení
Pohyb vzduchu	poznatelný jen o přestávkách, jinak klid
Pachy	ochrana před pachy ventilací, pachovými filtry a nátěry neabsorbujícími pachy
Zrakové vjemy	světle šedá nebo bílá barva, bez výzdoby
Kontakt s lidmi	příhrady mezi hodnotiteli, kóje

Předkládané vzorky musí odpovídat hygienickým předpisům pro zdravotní nezávadnost, musí se podávat v dostatečném množství a při předepsané teplotě a způsobu podávání. Z důvodu možného ovlivnění hodnocení je důležitou zásadou dodržování anonymity vzorků (řešeno kódováním). Vzorky by také měly být podávány v náhodném pořadí [59].

Senzorické atributy potravin jsou většinou hodnoceny v následujícím pořadí: vzhled, vůně (aroma), konzistence (textura) a flavor (komplexní vnímání chuti, vůně a dotyku). Většina nebo dokonce všechny tyto atributy se navzájem překrývají, a proto je pro nezkušeného hodnotitele bez tréninku obtížné zhodnotit je jednotlivě [60, 61].

2.6.2 Metody senzorické analýzy

Metod používaných pro senzorické hodnocení je celá řada. Jejich výběr závisí na charakteru úkolu, na počtu a kvalitě hodnotitelů, na čase, který je možno analýze věnovat, na množství vzorku, na prostředí zkoušky a na statistické chybě, kterou je možno tolerovat. Senzorické testy lze rozdělit do dvou skupin, na testy objektivní a subjektivní. Objektivní testy zahrnují rozdílové a popisné metody a provádějí je pouze školení hodnotitelé. Subjektivní (hedonické) testy informují o vztahu hodnotitele k výrobku; zda produkt hodnotiteli chutná nebo nechutná. Dalším možným rozdělením je rozdělení na testy rozdílové, popisné a testy používající stupnice. Nejběžnější úkoly senzorické analýzy a příslušné vhodné metody jsou zobrazeny v tabulce 5 [59, 60].

Tabulka 5: Přehled nejběžnějších metod laboratorní senzorické analýzy [59]

Úkol	Vhodné metody
Stanovení existence rozdílů mezi vzorky	rozdílové zkoušky: párová, duo-trio, trojúhelníková, tetrádová, dva-z-pěti, čtyři-z-deseti; jednostimulová, dvoustimulová metoda
Stanovení velikosti rozdílu	rozdílové zkoušky; stupnicové metody
Stanovení preferencí	rozdílové zkoušky; stupnicové metody
Srovnání několika vzorků	pořadové zkoušky (preferenční nebo intenzivní)

Tabulka 5: Přehled nejběžnějších metod laboratorní senzorické analýzy – pokračování [59]

Úkol	Vhodné metody
Stanovení absolutní přijatelnosti a intenzity	stupnicové metody, zřetřovací metody, srovnání se stupnicí
Stanovení charakteru vjemu	metody senzorického profilu, metody volného popisu, srovnání se sadou standardů

Jako nejběžnější se v senzorické analýze používají **metody stupnicové**. Nejsou složité, ale vyžadují velkou praxi a dobré zaškolení k získání reprodukovatelných výsledků. Poskytují poměrně dobré kvantitativní vyjádření rozdílů mezi vzorky. Lze je rozdělit do dvou hlavních skupin:

- nominální (kategorové) – vzorek je zařazen do kategorie, neexistuje však pořadí jednotlivých stupňů;
- ordinální (pořadové) – intenzita, kvalita či příjemnost určité vlastnosti se mění určitým daným směrem, velikosti intervalů mezi jednotlivými stupni nejsou kvantifikovány a není známa velikost rozdílu mezi vzorky (tzn. intervaly nejsou stejné) [58, 59].

Popisné metody slouží k identifikaci specifických senzorických vlastností přítomných ve vzorku a případně i jejich kvantifikaci. Jsou výrazně závislé na stupni zaškolení, na zkušenostech, vlastnostech a vyjadřovacích schopnostech hodnotitele. Tyto metody mohou být klasifikovány jako jednoduché popisné zkoušky, senzorický profil a popisné analytické metody a profil volného výběru [60, 62].

Metoda senzorického profilu byla použita i v této práci. Senzorický profil se skládá z řady dílčích vlastností (deskriptorů), každý s vyjádřením intenzity/přijemnosti, a slouží k analýze nepatrných rozdílů v charakteru chuti, vůně, textury nebo flavoru. Posuzované deskriptory mohou být předem zadány nebo zvoleny senzorickým panelem, případně vybrány individuálně každým z hodnotitelů. Pro stanovení senzorického profilu lze využívat různé stupnice, pro méně zkušené hodnotitele se doporučuje stupnice pěti až devíti bodová se slovním popisem a pro zkušenější hodnotitele jsou vhodné grafické nestrukturované stupnice [60].

3. EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST

3.1 Laboratorní vybavení a chemikálie

3.1.1 Plyny

- Helium čistota 4.8, v tlakové lahvi s redukčním ventilem (SIAD, Česká republika)

3.1.2 Přístroje

- Plynový chromatograf Trace™ 1310 se split/splitless injektorem (Thermo Fisher Scientific Inc., Waltham, MA, USA)
- Hmotnostní detektor ISQ™ LT Single Quadrupole (Thermo Fisher Scientific Inc., Waltham, MA, USA) (viz obrázek 7)
- Knihovna spekter NIST/EPA/NIH, Verze 2.0 (Gaithersburg, Maryland, USA)
- Analytické digitální váhy HELAGO, GR-202-EC, Itálie



Obrázek 7: Plynový chromatograf Trace™ 1310 s hmotnostním detektorem ISQ™ LT

3.1.3 Pracovní pomůcky

- SPME-vlákno DVB/CAR//PDMS 50/30 μm (Supelco, Bellefonte, Pennsylvania, USA)
- Mikropipety BiohitProline (100–1000 μm), špičky
- Vialky o objemu 10 ml se šroubovacím magnetickým uzávěrem
- Běžné laboratorní sklo a pomůcky

3.1.4 Chemikálie

Byly použity následující chemikálie a standardy alergenních vonných látek, všechny v čistotě p.a.

- α -Amylcinnamaldehyd 97 %, Sigma–Aldrich
- α -Amylcinnamyl alkohol ≥ 85 %, Fluka Analytical
- Anýzalkohol 98 %, Sigma–Aldrich

- Benzylalkohol 99 %, Alfa Aesar
- Benzylbenzoát 99 %, Alfa Aesar
- Cinnamaldehyd ≥ 93 %, SAFC Supply Solution
- Cinnamylalkohol 98 %, Alfa Aesar
- Citral, cis + trans 95 %, Alfa Aesar
- Citronellol 96 %, Alfa Aesar
- Kumarin 98 %, Alfa Aesar
- Eugenol 99 %, Alfa Aesar
- Farnesol 95 %, Sigma–Aldrich
- Geraniol 97 %, Alfa Aesar
- α -Hexylcinnamal ≥ 95 %, SAFC Supply Solution
- 7-Hydroxycitroellal ≥ 95 %, Fluka Analytical
- Isoeugenol 98 %, Alfa Aesar
- α -Isomethylionon ≥ 85 %, Fluka Analytical
- Lilial ≥ 95 %, Sigma–Aldrich
- Limonen 97 %, Alfa Aesar
- Linalool 97 %, Alfa Aesar
- Lylal ≥ 97 %, Sigma–Aldrich
- Methyl 2-oktyonát 99 %, Sigma–Aldrich
- Heptan 99 %, Sigma–Aldrich
- Methanol 99,5 %, Lach-Ner

3.2 Analyzované vzorky

Celkem bylo analyzováno pět náhodně vybraných vzorků kandytových cukrovinek, konkrétně dropsů (viz obrázek 8), českých i zahraničních výrobců, zakoupených v běžné tržní síti. Pro tuto práci byly vybrány 4 druhy barev (příchutí): oranžová (pomeranč), zelená (jablko), žlutá (citrón) a červená (jahoda). Vzorky byly skladovány v chladničce při teplotě 12°C až do doby analýzy. Podrobnější informace o složení jednotlivých vzorků (uvedené na etiketě výrobku) uvádí tabulka 6.



Obrázek 8: Analyzované vzorky, zleva výrobce A, B, C, D a E

Příprava vzorků k analýze: vzorky kandytů byly před samotnou analýzou rozdrceny v třecí misce na částice o velikosti cca 2–3 mm. Do vialek o objemu 10 ml byly naváženy přibližně 3 g vzorku (viz obrázek 9). Vzorek byl nanášen na dno vialky tak, aby nedošlo k pozdějšímu kontaktu s SPME vláknem. Poté byla vialka umístěna do autosampleru a neprodleně spuštěna analýza.



Obrázek 9: Vzorky připravené k analýze

Tabulka 6: Přehled analyzovaných vzorků (informace uvedené na obale)

Výrobce	Popis	Vyrobeno	Hmotnost	Složení
A	Drops s ovocnými příchutěmi	Česká republika	90 g	Cukr, glukózový sirup, kyselina mléčná, aroma (meruňka, višň, švestka, jahoda, maracuja, limetka), ovocné šťávy z koncentrátů 0,2 % (meruňková, višňová, švestková, jahodová, marakujová, limetková), rostlinné koncentráty (ibísek, mrkev, černý rybíz, světlice barvířská, ředkev), sirup z invertního cukru, barviva (karoteny, chlorofyly a chlorofyliny).
B	Bonbóny s ovocnou příchutí	Česká republika	90 g	Glukózový sirup, cukr, regulátor kyselosti, kyselina citrónová, aroma, přírodní aroma 0,4 % (citrón, pomeranč), barviva: kurkumin, mědnaté komplexy chlorofylů a chlorofylinů, kapsanthin, kapsorubin, anthokyany, košenila.
C	Dropsy s ovocnými příchutěmi	Polsko	100 g	Cukr, glukózový sirup, regulátor kyselosti (kyselina citrónová), koncentrované ovocné šťávy (0,1%) (citrónová, pomerančová, jablečná, jahodová, malinová, z černého rybízu), aroma, koncentrovaná šťáva z černé mrkve, barviva (kurkumin, mědnaté komplexy chlorofylů a chlorofylinů, paprikový extrakt).
D	Drops s ovocnými příchutěmi	Německo	200 g	Glukózový sirup, cukr, kyselina citrónová, rostlinné extrakty (mrkev, červená řepa, řasa spirulina), koncentrát třešňové šťávy, aroma.
E	Drops s ovocnou příchutí	Česká republika	200 g	Cukr, glukózový sirup, kyselina citrónová, kyselina mléčná, 0,9% koncentrát ovocné šťávy (jablko, hruška, třešeň, pomeranč, citron), přírodní aroma, rostlinné extrakty (kurkuma, černá mrkvová šťáva), barvivo: mědnaté komplexy chlorofylů a chlorofylinů.

Pro zachování anonymity distributora jsou testované vzorky zakódovány. Vzorky oranžové A01, B01, C01, D01 a E01, vzorky zelené A02, B02, C02, D02 a E02, vzorky žluté barvy A03, B03, C03, D03 a E03, a červené vzorky A04, B04 a C04. Výrobce D a E nemá dropsy červené barvy, proto nebyly zahrnuty do analýzy.

3.3 Metoda HS-SPME-GC/MS

Pro identifikaci a kvantifikaci těkavých aromatických látek ve vzorcích cukrovinek byla použita metoda headspace mikroextrakce na pevné fázi ve spojení s plynovou chromatografií s hmotnostní detekcí (HS-SPME-GC-MS).

3.3.1 Podmínky SPME extrakce

- Doba inkubace (temperování) 10 minut
- Doba extrakce 20 minut
- Teplota extrakce a inkubace (teplota agitátoru) 40 °C
- Agitátor zapnutý 5 sekund, vypnutý 60 s
- Množství vzorku 3 g
- Hloubka ponoření vlákna do vialky 20 mm

3.3.2 Podmínky GC-MS analýzy

- Kapilární kolona TG–WaxMS (30 m × 0,25 mm × 0,5 μm)
- Teplota injektoru (desorpce) 240 °C
- Doba desorpce 20 minut
- Dávkování splitless, ventil uzavřen 10 minut
- Hloubka ponoření vlákna do injektoru 40 mm
- Nosný plyn helium, průtok 1 ml·min⁻¹
- Teplotní program 40 °C s výdrží 1 min., vzestupný gradient 5°C/min do 220 °C s výdrží 22 min., celková doba analýzy 60 minut
- Hmotnostní detektor v modu EI, energie ionizačních elektronů 70 eV, teplota iontového zdroje 200 °C, skenovací rozsah m/z 30–370 amu, rychlost skenování 0,2 s

3.3.3 Vyhodnocení výsledků HS-SPME-GC-MS analýzy

3.3.3.1 Příprava kalibračních přímek standardů

Ze standardů byly vytvořeny zásobní roztoky v methanolu o koncentraci 10 mg·ml⁻¹ v objemu 10 ml, které byly následně ředěny na požadovanou koncentraci. Z každého standardu bylo připraveno min. 5 různých koncentrací a analyzováno za stejných experimentálních podmínek jako vzorky.

3.3.3.2 Identifikace a kvantifikace těkavých látek ve vzorcích

Vyextrahované těkavé látky ve vzorcích byly identifikovány pomocí programu Xcalibur 2.2 (Thermo Scientific Inc, Waltham, MA, USA) na základě srovnání hmotnostních spekter s dostupnou knihovnou spekter. Obsah identifikovaných sloučenin je vyjádřen semikvantitativně pomocí ploch příslušných píků na chromatogramu.

Identifikace alergenních vonných látek byla navíc potvrzena srovnáním retenčních časů s dostupnými standardy. Pro jejich kvantifikaci byly použity rovnice lineární regrese kalibračních přímek standardů.

3.4 Senzorická analýza

Senzorické hodnocení probíhalo až po analýze HS-SPME-GC-MS. Byly použity tytéž vzorky jako pro stanovení aromatických látek.

Vzorky byly před samotným hodnocením ponechány při pokojové teplotě a rozděleny do plastových kelímků s nadepsaným kódem výrobce. Jako neutralizátor chuti měli hodnotitelé k dispozici pitnou vodu. Vzorky připravené k senzorické analýze jsou zobrazeny na obrázku 10.



Obrázek 10: Vzorky připravené k senzorické analýze

Hodnotiteli byli studenti a zaměstnanci FCH VUT, kteří byli reprezentanty běžných spotřebitelů. Před samotným hodnocením byly hodnotitelům sděleny základní instrukce. Oranžová barva byla hodnocena společně se zelenou barvou a žlutá s červenou. Celkově se hodnocení zúčastnilo 15 osob, z toho 5 mužů a 10 žen.

Senzorická analýza se skládala z hodnocení pomocí stupnic, profilového testu a popisných zkoušek.

Barva, vůně a chuť (flavour) vzorků byly hodnoceny pomocí grafické strukturované stupnice (10 cm), jednak z hlediska intenzity (neznatelná až velmi silná), tak i příjemnosti (nepřijatelná až vynikající).

V profilovém testu měli hodnotitelé určit intenzitu vybraných deskriptorů chuti (sladká, kyselá. Jiná) pomocí obdobně grafické strukturované stupnice (neznatelná až velmi silná). U jiné chuti (pokud byla detekována) byli hodnotitelé požádáni danou chuť popsat.

Na závěr byla hodnocena celková přijatelnost vzorku opět pomocí grafické strukturované stupnice (vzorek nepřijatelný až vynikající).

Formulář pro senzorickou analýzu je uveden v příloze 1.

3.5 Statistické zpracování výsledků

Výsledky byly zpracovány pomocí programu Microsoft Office Excel 2013.

Obsah identifikovaných sloučenin je vyjádřen semikvantitativně pomocí ploch příslušných píků na chromatogramu. Obsah alergenních vonných látek je vyjádřen ve tvaru průměr \pm směrodatná odchylka. Každý vzorek byl analyzován dvakrát ($n = 2$).

Výsledky senzorické analýzy jsou vyjádřeny graficky jako průměr hodnocení všech hodnotitelů ($n = 15$), chybové úsečky vyjadřují směrodatnou odchylku měření.

4. VÝSLEDKY A DISKUZE

Tato diplomová práce je pilotní studie zabývající se studiem nečokoládových cukrovinek se zaměřením především na flavour a s ním souvisejícím obsahem aromaticky aktivních látek.

Podstatou této práce je stanovení aromaticky aktivních látek ve vybraných vzorcích nečokoládových cukrovinek a následně jejich senzorická analýza. Jako modelové vzorky byly vybrány kandytové cukrovinky typu dropsy; konkrétně byly analyzovány 4 druhy barev (příchutí) od pěti výrobců: oranžová (pomeranč), zelená (jablko), žlutá (citron) a červená (jahoda).

Cílem práce (i) bylo posoudit rozdíly v obsahu AAL mezi vzorky stejného typu/příchutě od pěti různých výrobců, (ii) posoudit rozdíly v obsahu AAL mezi jednotlivými příchutěmi, (iii) posoudit rozdíly v senzorické kvalitě obdobných vzorků od různých výrobců, (iv) identifikovat a kvantifikovat alergenní vonné látky ve vzorcích a posoudit jejich možné nežádoucí účinky při konzumaci cukrovinek.

Dropsy jsou dle platné legislativy (vyhláška č. 43/2005 Sb.) definovány jako „cukrovinky neplněné, z kandytové hmoty, složené převážně z cukrů a glukózového sirupu, různě tvarované, různé barvy a chuti a tvrdé konzistence“. Na trhu je dostupné velké množství těchto produktů jak tuzemských, tak zahraničních výrobců, různých barev a příchutí. Jelikož senzorická atraktivita je důležitou součástí kvality těchto produktů, bývá při jejich výrobě používáno mnoho různých aditivních látek, zejména barviv a aromatických látek.

Pod pojem „aroma“ lze zahrnout jak vonné látky přírodní, tak syntetické látky s aromatickými vlastnostmi. Tyto látky jsou přidávány do pochutin/potravin za účelem zlepšení jejich chuti a vůně, přizpůsobení chuti požadavkům spotřebitele a v neposlední řadě především z důvodu nahrazení omezených zdrojů přírodních ochucujících surovin surovinami levnějšími.

Problémem však je, že pod pojem „aroma“ se mohou zahrnout i aromatické látky, které byly klasifikovány kosmetickou legislativou (Nařízení č. 1223/2009/ES) jako potenciálně alergenní. Dílčím cílem této práce tedy bylo, jak je výše zmíněno, posoudit případnou přítomnost alergenních AAL ve vzorcích.

Pro stanovení AAL, alergenních i nealergenních, byla zvolena metoda HS-SPME-GC-MS, podmínky analýzy jsou uvedeny v kapitole 3.3.

Pro senzorické hodnocení byly aplikovány metody podle platných ČSN (viz kapitola 2.6.2).

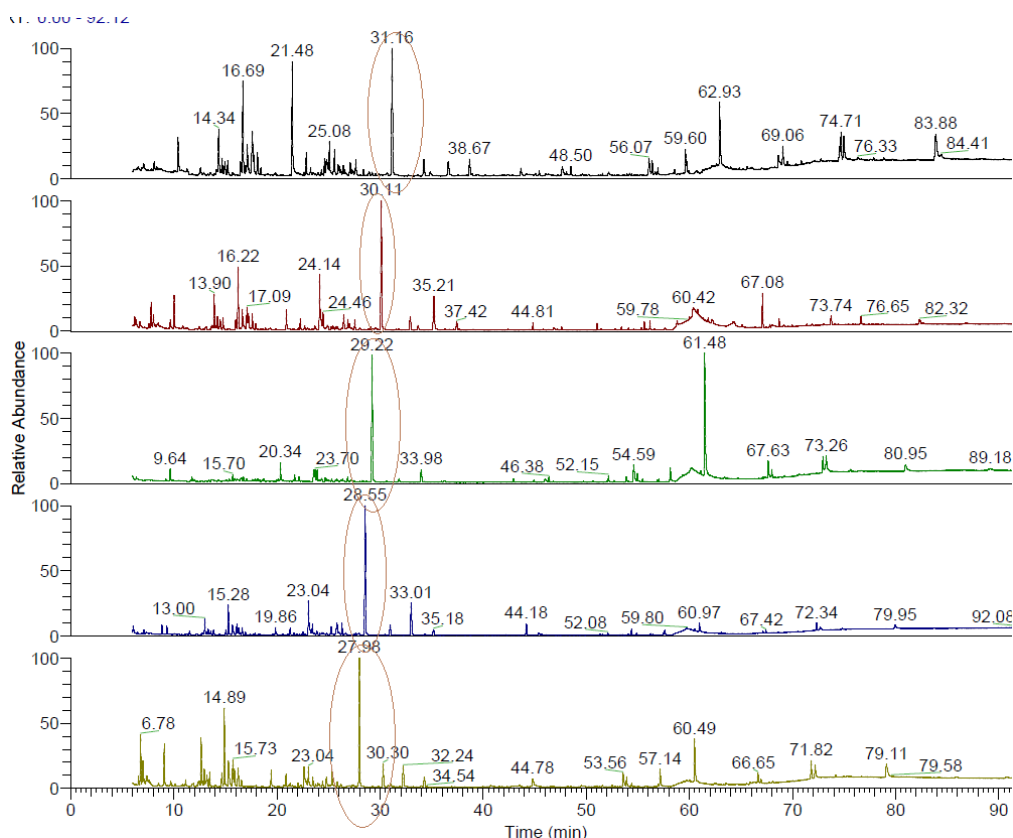
4.1 Optimalizace vybraných parametrů HS-SPME-GC-MS metody

Pro analýzu nečokoládových cukrovinek byla převzata metoda HS-SPME-GC-MS, která byla optimalizována a validována pro stanovení aromaticky aktivních látek v přírodních a tavených sýrech [63]. Protože obsah AAL v cukrovinkách je bohatší, než je tomu u sýrů, a především bylo naším cílem zachytit všechny potenciálně alergenní AAL, z nichž některé jsou méně těkavé, a tedy lze předpokládat dlouhý retenční čas, byla potřeba změnit některé parametry původní metody. První optimalizační měření byla provedena v práci [64], která se zabývala analýzou bylin, a následně v práci [65], která se také zabývala analýzou cukrovinek. Pro zachycení všech alergenních AAL byla použita poměrně dlouhá doba analýzy (90 minut), což je samozřejmě nevýhodné pro rutinní analýzu. Žádoucí je pokud možno zachytit všechny alergenní AAL, ale při zachování co nejkratší doby analýzy. Za tímto účelem byl v této práci

optimalizován teplotní program a průtok nosného plynu s použitím směsí standardů potenciálně alergenních vonných látek; poté následovala samotná analýza vzorků.

4.1.1 Průtok nosného plynu

Průtok nosného plynu má zásadní vliv na rychlost analýzy, účinnost separace a rozšiřování zón separovaných látek, které by mělo být co nejmenší. Podle literatury je pro náš typ kolony z hlediska účinnosti považován za optimální průtok cca $1,4 - 2 \text{ ml} \cdot \text{min}^{-1}$. V práci byl testován průtok v rozsahu $1 - 2 \text{ ml} \cdot \text{min}^{-1}$. Jak je patrné z obrázku 11, postupné zvyšování rychlosti nosného plynu nemělo zásadní vliv na rychlost/dobu celkové analýzy. Se změnou průtoku o hodnotu $0,2 \text{ ml} \cdot \text{min}^{-1}$ byla analýza rychlejší o necelou minutu, což v porovnání s celkovou dobou analýzy bylo zanedbatelné. Pro dosažení maximální kvality píků byl nakonec jako optimální zvolen pomalejší průtok ($1 \text{ ml} \cdot \text{min}^{-1}$).



Obrázek 11: Zvyšování průtoku nosného plynu
(shora $1 \text{ ml} \cdot \text{min}^{-1}$, $1,2 \text{ ml} \cdot \text{min}^{-1}$, $1,4 \text{ ml} \cdot \text{min}^{-1}$, $1,6 \text{ ml} \cdot \text{min}^{-1}$ a $1,8 \text{ ml} \cdot \text{min}^{-1}$)

4.1.2 Teplotní program

I teplotní program byl upraven tak, aby došlo k max. oddělení jednotlivých píků a tím i správné identifikaci. V tabulce 7 je uvedeno srovnání původní [64, 65] a konečné varianty teplotního programu.

Počáteční teplota by měla být co nejnižší, jelikož se mezi sledovanými aromatickými látkami vyskytují i ty s velmi nízkým bodem varu. Pro jejich separaci byl původně zvolen pomalejší začátek analýzy, který trval 2 minuty. Jelikož ale látek s velmi krátkým retenčním časem nebylo mnoho, bylo dostačující ponechání této teploty po dobu 1 minuty.

Mezikrok při zahřívání byl odstraněn a byl zvýšen krok ze $3^\circ\text{C} \cdot \text{min}^{-1}$ na $5^\circ\text{C} \cdot \text{min}^{-1}$. Jelikož se na počátku analýzy na chromatogramu neobjevovaly žádné identifikované látky, bylo

skenování nastaveno až od šesté minuty. Podmínky současného teplotního programu jsou dostačující pro identifikaci všech potenciálně alergenních látek a zároveň byla značně zkrácena doba analýzy (z 90 na 60 minut).

Tabulka 7: Srovnání nastavení původního a současného teplotního programu

Původní teplotní program			Současný teplotní program		
krok	teplota	výdrž	krok	teplota	výdrž
	40°C	2 min		40°C	1 min
3°C · min ⁻¹	do 110 °C	10 min	5°C · min ⁻¹	do 220 °C	22 min
3°C · min ⁻¹	do 220 °C	20 min			

4.1.3 Ověření vybraných validačních parametrů metody

Pro ověření kvality a funkčnosti metody je nezbytné ji validovat. Validace je definována např. jako proces, při kterém se určuje vhodnost použití daného systému pro získání relevantních dat. Za základní validační parametry jsou považovány opakovatelnost, reprodukovatelnost, linearita, meze detekce a meze stanovitelnosti [63, 66].

4.1.3.1 Opakovatelnost

Opakovatelnost je typ přesnosti vztahující se k měřením provedeným za opakovatelných podmínek; charakterizuje metodu a preciznost jejího provedení v laboratoři. Analýzy jsou vykonány všechny najednou tou samou osobou na stejném pracovišti a se stejným vzorkem [63, 67].

Metoda je opakovatelná, pokud u všech výsledků měření, provedeného za podmínek opakovatelnosti, nepřesáhne relativní směrodatná odchylka (RSD) hodnotu 10 % [63].

Opakovatelnost byla provedena ze série pěti měření, která byla realizována v průběhu jednoho dne. Bylo analyzováno pět vzorků s podobnou navázkou (přibližně 3 mg) jahodového dropsu. Analýzy byly provedeny za optimalizovaných podmínek metody HS-SPME-GC-MS.

Tabulka 8 zobrazuje odečtené plochy píků z chromatogramů jednotlivých vzorků a vypočtené hodnoty SD a RSD pro vybrané sloučeniny. V tabulce je vidět, že hodnota RSD byla u dvou sloučenin (methyl-2-methylbutyrát a hexanol) mírně vyšší než 10 %, pro získání dobrých kvantitativních výsledků bude potřeba zlepšit přesnost této metody.

Tabulka 8: Opakovatelnost plochy píků vybraných sloučenin

Plocha píku [mV·s]					
Měření	Methyl-2-methylbutyrát	Hexanol	Linalool	Ethyl laurát	δ -dekalakton
1	1009967774,0	72207646,0	9012344299,0	287731829,0	2074323398,0
2	773700633,0	62712108,0	9593847900,0	324381459,0	2155144878,0
3	664739635,0	52350933,0	8612018887,0	359768485,0	2534779970,0
4	873566031,0	57758092,0	7825942406,0	310790433,0	2148521681,0
5	741592839,0	49948908,0	7588656543,0	363745201,0	2513667033,0
SD [mV·s]	119238161,7	7948537,6	742013608,5	29015540,8	197256963,0
RSD [%]	14,67	13,47	8,70	8,81	8,63

V tabulce 9 jsou uvedeny naměřené retenční časy vybraných sloučenin a vypočtené hodnoty SD a RSD. Jak lze vidět, RSD se pohybovala většinou pod 1 %, u δ -dekalaktonu byla

1,26 %. Tato hodnota nepřesáhla tedy ani u jedné sloučeniny hranici 10 %, což lze hodnotit kladně z hlediska budoucí identifikace analytů.

Tabulka 9: Opakovatelnost retenčních časů vybraných sloučenin

Retenční čas [min]					
Měření	Methyl-2-methylbutyrát	Hexanol	Linalool	Ethyl laurát	δ -dekalakton
1	5,41	14,13	19,17	25,91	32,32
2	5,44	14,13	19,16	25,89	31,31
3	5,44	14,13	19,17	25,91	32,32
4	5,44	14,14	19,17	25,92	32,33
5	5,44	14,13	19,16	25,90	32,32
SD [mV·s]	0,01	0,00	0,00	0,01	0,41
RSD [%]	0,22	0,03	0,03	0,04	1,26

4.1.3.2 Reprodukovatelnost

Reprodukovatelnost na rozdíl od opakovatelnosti vypovídá o chybě při reprodukci výsledků s daným vzorkem a stejnou metodou, ale se změněnými podmínkami jako např.: místo, pozorovatel, čas apod. [63, 66].

Reprodukovatelnost byla provedena ze série pěti měření, která byla provedena jinou osobou v průběhu 14 dní. Byly analyzovány stejné vzorky jako v případě opakovatelnosti (jahodový drops s navážkou cca 3 g).

V tabulce 10 jsou uvedeny odečtené plochy píků vybraných sloučenin a hodnoty SD a RSD. Jak je vidět, v případě reprodukovatelnosti se hodnoty SD pohybovaly v rozmezí od 40 do 46 %, což jsou hodnoty výrazně překračující hranici 10 %. Jak už bylo výše zmíněno, pro proces kvantifikace je potřeba metodu dále optimalizovat.

Tabulka 10: Reprodukovatelnost plochy píků vybraných sloučenin

Plocha píku [mV·s]					
Měření	Methyl-2-methylbutyrát	Hexanol	Linalool	Ethyl laurát	δ-dekalakton
1	1171604912	89205245	8634358952	240583067	2125751466
2	926225538	74798527	8196880186	287215100	2400666146
3	1824804653	148913607	10056234853	348701112	2723882727
4	396324528	35027293	7576009987	246330288	1592581107
5	1571002388	158316031	9675932587	272302814	2243258378
SD [mV·s]	499450690	46386538,51	919873744,2	38765326	371369854
RSD [%]	42,40	45,81	10,42	13,89	16,75

Tabulka 11 zobrazuje naměřené retenční časy vybraných sloučenin a vypočtené hodnoty SD a RSD. Na základě hodnot RSD, které byly menší jak 1 %, můžeme vyvodit, že daná metoda je z hlediska identifikace velmi dobrá.

Tabulka 11: Reprodukovatelnost retenčních časů vybraných sloučenin

Retenční čas [min]					
Měření	Methyl-2-methylbutyrát	Hexanol	Linalool	Ethyl laurát	δ -dekalakton
1	5,46	14,14	19,18	25,91	32,33
2	5,47	14,18	19,2	25,94	32,37
3	5,46	14,18	19,22	25,97	32,38
4	5,44	14,14	19,17	25,92	32,33
5	5,47	14,17	19,2	25,93	32,35
SD [mV·s]	0,01	0,02	0,02	0,02	0,02
RSD [%]	0,20	0,13	0,09	0,08	0,06

Z uvedených výsledků je jasné, že metoda vykazuje výbornou přesnost pro identifikaci, ale velmi malou přesnost pro kvantifikaci, zvláště u stanovení reprodukovatelnosti; velmi pravděpodobně to může být použitou extrakční technikou, SPME má řadu výhod (viz kapitola 2.5.1.2), ale na druhou stranu je velmi citlivá na okolní vlivy, obecně vykazuje horší reprodukovatelnost a robustnost, např. díky opotřebování vlákna, toto je zvláště patrné v módu HS-SPME.

Z tabulek 8 a 10 je vidět, že opakovatelnost/reprodukovatelnost je špatná zvláště u sloučenin s krátkým retenčním časem, tj. hodně těkavých, toto může být způsobeno tzv. kompetitivní sorpcí. Vzhledem k použití autosampleru a automatizaci celého procesu však byly nezbytné konstantní podmínky extrakce perfektně dodržovány. Podle literatury [44,52] má SPME nejlepší reprodukovatelnost až po dosažení rovnováhy, možná bude vhodné prodloužit dobu inkubace a extrakce (viz. 3.3.1.), toto bude náplní navazujících experimentů.

4.1.3.3 Linearita, meze detekce a meze stanovitelnosti

První validační měření byla provedena v předchozích diplomových pracích [64,65]. V rámci této práce byla dokončena kalibrace všech standardů vonných alergenů. Na základě sestavení kalibračních přímků závislosti plochy píků na koncentraci standardu byla stanovena linearita. Proložení spojnice trendu byla získána rovnice lineární regrese a koeficient determinace (R^2). Dále byly určeny meze detekce (LOD) a meze stanovitelnosti (LOQ). Veškeré naměřené validační parametry metody pro alergenní vonné látky jsou shrnuty v tabulce 12.

Tabulka 12: Přehled validačních parametrů metody HS-SPME-GC-MS pro stanovení alergenních vonných látek

Název	R_t [min]	Lineární rozsah [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]	R^2	LOD [$\text{ng}\cdot\text{ml}^{-1}$]	LOQ [$\text{ng}\cdot\text{ml}^{-1}$]
Limonen	10,02	0,003–100	0,995	0,001	0,003
Linalool	19,17	0,003–300	0,998	0,001	0,003
Methyl-2-oktynát	21,7	0,018–1000	0,999	0,006	0,018
Cital 1 (cis)	22,59	0,03–100	0,994	0,01	0,03
Citral 2 (trans)	23,74	0,03–100	0,994	0,01	0,03
β-citronellol	24,35	0,003–100	0,999	0,001	0,003
Geraniol 1	25,36	0,003–50	0,982	0,001	0,003
Geraniol 2	26,07	0,003–50	0,867	0,001	0,003
α-Isomethyl ionon	26,34	3–1000	0,984	1	3
Benzylalkohol	26,96	0,003–100	0,994	0,001	0,003

Tabulka 12: Přehled validačních parametrů metody HS-SPME-GC-MS pro stanovení alergenních vonných látek – pokračování

Název	R _t [min]	Lineární rozsah [μg·ml ⁻¹]	R ²	LOD [ng·ml ⁻¹]	LOQ [ng·ml ⁻¹]
Hydroxycitronellal	28,21	0,03–100	0,983	0,01	0,03
Lilial	30,29	5–1000	0,999	1	3
Cinnamaldehyd	30,47	0,003–1000	0,983	0,001	0,003
Eugenol	32,68	0,003–100	0,989	0,001	0,003
Amylcinnamal	34,41	0,03–100	0,992	0,01	0,03
Anisalkohol	34,8	3–1000	0,994	1	3
Cinnamylalkohol	34,9	3–1000	0,984	1	3
Farnesol 1	35,24	0,03–100	0,998	0,01	0,03
Farnesol 2	35,4	0,03–100	0,996	0,01	0,03
Farnesol 3	35,91	0,03–100	0,998	0,01	0,03
Isoeugenol	35,99	5–1000	0,981	0,5	1,5
Hexylcinnamal	36,15	3–1000	0,999	1	3
Benzylcinnamát	41,68	3–1000	0,993	1	3
Kumarin	38,14	0,3–1000	0,997	0,1	0,3
Lylal	38,17	3–1000	0,987	1	3
Amylcinnamylalkohol	39,32	3–1000	0,969	1	3
Benzylbenzoát	41,85	0,006–1000	0,999	0,002	0,006
Benzylsalicylát	46,66	3–1000	0,947	1	3

4.2 Identifikace těkavých látek ve vzorcích

Hlavním cílem této práce bylo identifikovat těkavé (aromaticky aktivní) látky ve vzorcích nečokoládových cukrovinek. Identifikace byla provedena na základě srovnání hmotnostních spekter s dostupnou knihovnou spekter. Pro zjištění, zda jsou identifikované sloučeniny skutečně vonné (aromaticky aktivní), výsledky byly porovnávány s dostupnou literaturou a s databázemi aromatických látek [37, 39, 68–75].

Obsah AAL ve vzorcích byl zjišťován pouze semikvantitativně srovnáním ploch píků jednotlivých sloučenin. Tento přístup se v praxi často používá, i přes určité zjednodušení lze tímto způsobem poměrně dobře postihnout rozdíly mezi vzorky.

Alergenní látky byly navíc potvrzeny srovnáním retenčních časů s odpovídajícími standardy a přesně kvantifikovány na základě provedené kalibrace standardů.

V tabulkách 13 až 17 jsou uvedeny jednotlivé AAL identifikované ve vzorcích, potenciální alergeny jsou zvýrazněny tučně. Vzhledem k mírným odchylkám retenčních časů (t_R) je u každé sloučeniny uveden průměr retenčních časů. Relativní směrodatná odchylka (RSD) se většinou pohybovala <1 %, čímž se potvrzuje výborná reprodukovatelnost metod z hlediska identifikace (viz kap. 4.1.3.2). V následujících grafech je vždy uvedeno srovnání počtu (grafy 1, 3, 5, 7 a 9) a obsahu (grafy 2, 4, 6, 8 a 10) identifikovaných sloučenin ve vzorcích různých barev.

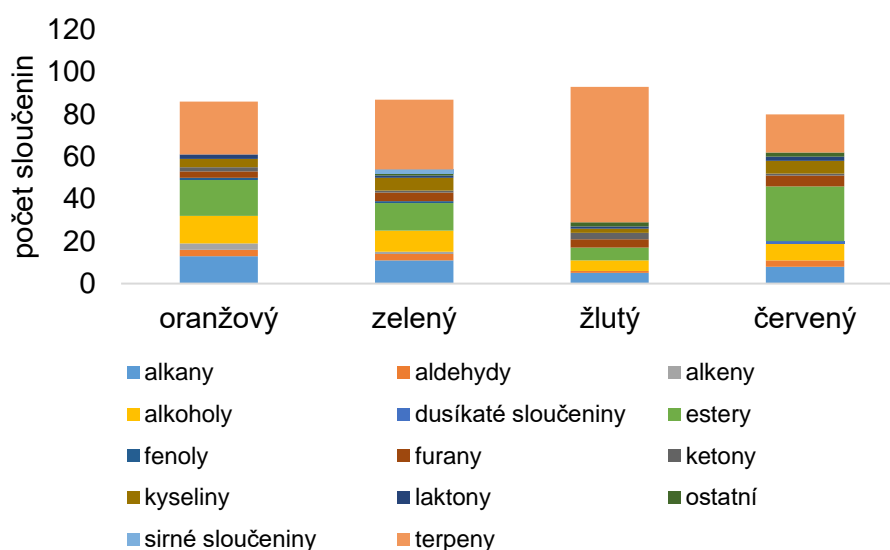
Ve všech vzorcích bylo identifikováno 393 těkavých sloučenin, včetně 19 alergenních, konkrétně limonen, linalool, citral, citronellool, geraniol, isomethylionon, benzylalkohol, cinnamal, kumarin, amylcinnamal, cinnamylalkohol, benzylcinnamát, lylal, benzylbenzoát, farnesol, isoeugenol, benzylsalicylát, hexylcinnamal a eugenol. Látky byly dále rozděleny do

skupin na alkany (23), alkeny (4), estery (97), kyseliny (19), aldehydy (18), alkoholy (41), ketony (14), furany (9), dusíkaté sloučeniny (2), sirné sloučeniny (2), fenoly (4), laktony (3) a na terpeny, které byly ještě rozřazeny do skupin na terpeny acyklické (5), monocyklické (19), bicyklické (20), tricyklické (3) a v případě, že jednalo o terpeny neobsahující pouze uhlík a vodík byly rozřazeny dále do skupiny na alkoholy (49), estery (11), aldehydy (17), furany (2), ketony (15), ehtery (3), terpeny epoxidového typu (2) a terpeny s pyranovým kruhem (2). Látky, které nebylo možné zařadit ani do jedné z těchto skupin, byly zařazeny do skupiny ostatní (9).

Chromatogramy jednotlivých vzorků jsou uvedeny v přílohách 2 až 19.

4.2.1 Vzorky výrobce A (Česká republika)

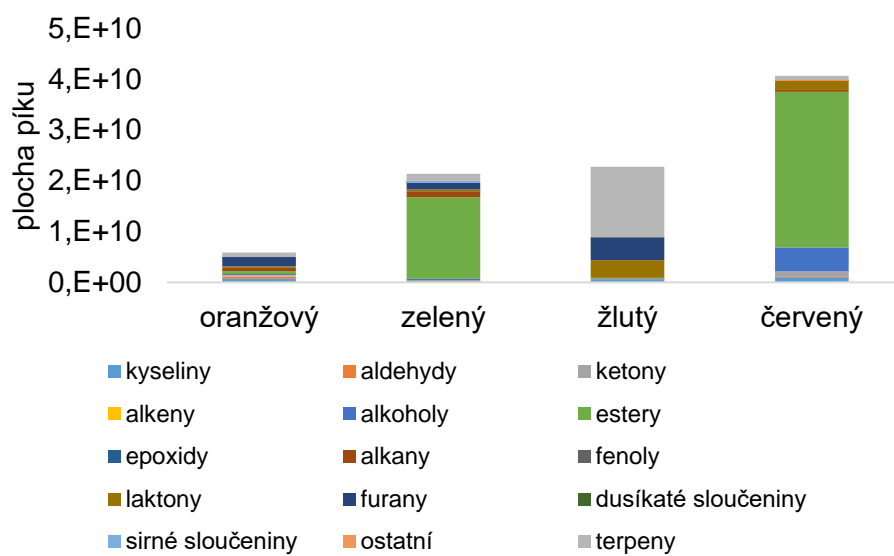
Ve vzorcích výrobce A bylo identifikováno 212 různých těkavých vonných látek, z nichž bylo 19 alergenních (včetně 3 izomerů). Srovnání počtu identifikovaných sloučenin lze vidět v grafu 1. Celkový přehled identifikovaných AAL je uveden v tabulce 13.



Graf 1: Srovnání počtu identifikovaných sloučenin podle chemických skupin ve vzorcích výrobce A

Z grafu 1 jsou patrné rozdíly mezi jednotlivými barvami (příchutěmi). Nejvíce sloučenin bylo identifikováno ve vzorku žlutém (91), z nichž více jak polovinu tvořily látky terpenového typu (64). Naopak nejméně sloučenin bylo identifikováno ve vzorku červeném, který obsahoval 78 různých AAL, z nichž většinu tvořily látky patřící do skupiny esterů (26).

Z grafu 2, který zobrazuje obsahové složení jednotlivých skupin AAL, je patrné, že ač většinu identifikovaných sloučenin tvořily ve všech vzorcích terpeny, z hlediska obsahu převyšují u některých zcela odlišné skupiny. U vzorku zeleného a červeného to jsou především estery.



Graf 2: Srovnání obsahu identifikovaných sloučenin podle chemických skupin ve vzorcích výrobce A

Tabulka 13: Identifikované těkavé látky ve vzorcích výrobce A

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
1	ester	isobutylacetát	5,51	x			
2	monocyklický terpen	α -pinen	5,63			x	
3	ester	ethylbutyrát	6,03	x	x		x
4	ester	ethylester kyseliny 2-methylbutanové	6,34				x
5	bicyklický terpen	kamfen	6,34			x	
6	alkan	dodekan	7,24	x			
7	bicyklický terpen	sabinen	7,93			x	
8	monocyklický terpen	α -felandren	8,87			x	
9	ester	3-methylbutylester kyseliny octové	8,10	x			x
10	alkan	2,7,10-trimethyldodekan	8,81		x		
11	acyklický terpen	β -myrcen	9,19	x		x	
12	alkan	tetradekan	9,14		x		
13	aldehyd	1-heptanal	9,77	x	x		x
14	ester	isopentylester kyseliny isobutanové	9,87	x			
15	monocyklický terpen	limonen	10,09	x	x	x	x
16	alkohol	1-pentanol	10,82	x			
17	monocyklický terpen ether	eukalyptol	10,33		x	x	x
18	alkan	2,6,11-trimethyldodekan	10,76	x	x		
19	alkan	hexadekan	10,47				x
20	alkan	2,8,8-trimethyldekan	10,83			x	
21	ester	ethylester kyseliny hexanové	11,07	x	x		x
22	alkan	pentadekan	11,20	x	x		
23	alkan	2,6,11-trimethyldodekan 2	11,20	x	x		
24	alkan	pentadekan 2	11,34	x			
25	monocyklický terpen	terpinen	11,48			x	x
26	acyklický terpen	cis-ocimen	11,63			x	

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
27	monocyklický terpen	<i>m</i> -cymen	11,98	x	x		
28	ester	3-hexenylacetát	13,29		x		x
29	monocyklický terpen	<i>p</i> -cymen	12,27			x	
30	alkan	2,6,11-trimethyldodekan 3	12,26	x	x		
31	monocyklický terpen	terpinolen	12,46			x	
32	bicyklický terpen	4-karen	12,40			x	
33	keton	acetoin	12,59	x			
34	alken	tetrakosen	12,92	x			
35	alkan	2,3,5-trimethyldekan	12,82				x
36	ester	isobutyl ester kyseliny 6-ethylokt-3-yl- šřavelové	13,16			x	
37	alkan	5-methyl-5-propyl-nonan	13,16				x
38	keton	2-acetyl-4,4-dimethyl-cyklopent-2-enon	13,40			x	
39	alkohol	1-butoxy-2-propanol	13,83	x			
40	keton	6-methyl-5-hepten-2-on	13,90			x	
41	ester	ethylaktát	14,01	x			
42	alkan	hexadekan	13,60		x		x
43	alkan	heptadekan	14,13			x	
44	alkan	2,6-dimethylheptadekan	14,17	x			
45	alkan	3,8-dimethylundekan	14,54	x	x		
46	terpen pyran	<i>trans</i> -roseoxid	14,30		x	x	
47	alkohol	4-hexen-1-ol	14,47				x
48	terpen pyran	<i>trans</i> -roseoxid 2	14,56	x	x	x	
49	ester	butylester kyseliny butanové	14,84		x		
50	ester	methyl isobutyřát	23,04				x
51	keton	3-oktadekanon	14,57			x	
52	kyselina	kyselina máselná	21,61				x
53	acyklický terpen	<i>neo-allo</i> -ocimen	14,04			x	
54	ester	hexenylester kyseliny propionové	15,01	x			

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
55	alkohol	<i>trans</i> -3-hexen-1-ol	14,48				x
56	alkohol	<i>cis</i> -3-hexen-1-ol	15,04		x		x
57	dusíkatá látka	isopropenylpyrazin	14,89				x
58	ester	3-hexenyl-isobutyrát	15,13				x
59	alkan	tetradekan	15,13	x		x	
60	aldehyd	nonanal	15,36	x	x		x
61	ester	ethylester kyseliny oktanové	16,33	x	x		x
62	monocyklický terpen	1,3,8- <i>p</i> -menthatrien	15,70			x	
63	alken	1-ethoxy-4-methyl-2-penten	15,60	x			
64	ester	<i>cis</i> -3-hexenyl- α -methylbutyrát	16,75	x			
65	alkan	heptakosan	15,96	x			
66	alkan	heneikosan	15,98		x		
67	ostatní	1,1-diethoxyoktan	21,19			x	
68	alkohol	3,7-dimethyl-3-oktanol	16,16	x			
69	alkan	oktadekan	16,15		x	x	
70	alkan	2,6,11-trimethyldodekan 4	16,22	x			
71	alkan	hexadekan2	15,69	x			
72	monocyklický terpen	1,3,8- <i>p</i> -menthatrien 2	16,27			x	
73	alkan	cyklotetradekan	16,37			x	
74	monocyklický terpen	<i>p</i> -cymen 2	16,55	x	x	x	x
75	alkohol	1-okten-3-ol	16,69	x			
76	terpen epoxid	limonen-1,2-epoxid	16,76			x	
77	alkan	9-hexylheptadekan	16,87	x			
78	ester	3-hexenylester kyseliny butanové	17,02		x		x
79	alkohol	2,6-dimethyl-7-okten-2-ol	17,13	x	x		
80	alkohol	3-pentanol	17,12		x		
81	monocyklický terpen keton	<i>trans</i> - <i>p</i> -menthan-3-on	17,22		x		x
82	kyselina	octová kyselina	17,21	x	x		
83	monocyklický terpen	γ -elemen	17,24			x	

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
84	furan	furfural	17,37	x	x	x	x
85	tricyklický terpen	isoleđen	17,61			x	
86	alkan	3,8,-dimethyldekan	16,93	x	x		x
87	ester	oktylester kyseliny octové	17,40				
88	alkan	oktadekan	17,62	x	x		x
89	alkohol	2-ethyl-1-hexanol	17,72	x	x		
90	ester	<i>cis</i> -3-hexenyl- α -methylbutyrát 2	18,31				x
91	bicyklický terpen	karyofylen	17,75			x	
92	bicyklický terpen	kadina-1,4-dien	17,25			x	
93	alkan	9-hexylheptadekan 2	17,87		x		
94	alkan	eikosan	17,94	x			
95	monocyklický terpen keton	<i>trans-p</i> -menthan-3-on 2	17,94				x
96	aldehyd	dekanal	18,02				x
97	aldehyd	dekanal 2	18,17			x	
98	alkohol	2-hexyl-1-oktanol	18,05		x		x
99	alken	pentakosen	18,05	x	x		
100	alkan	9-hexylheptadekan 3	18,14		x		
101	ester	propylacetát	18,41				x
102	tricyklický terpen	β -bourbonen	18,48		x		
103	alkohol	2-undeken-4-ol	18,53			x	
104	bicyklický terpen keton	(+)-2-bornanon	18,61			x	
105	alkohol	1-(2-methoxypropoxy)-2-propanol	18,63	x	x		
106	ostatní	2-heptyl-4-methyl-1,3-dioxolan	17,41			x	
107	sírná sloučenina	methyl ester kyseliny 3-(methylthio)propanové	18,76		x		
108	furan	2,4-dihydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furanon	18,88		x	x	x
109	aldehyd	benzaldehyd	18,97	x			
110	alkohol	2,3-butandiol	19,24	x	x		

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
111	alkohol	tetraethylenglykol	19,06				
112	furan	furfurylacetát	19,05				x
113	acyklický terpen alkohol	linalool	19,18	x	x	x	
114	Terpen furan	rosefuran	16,10			x	
115	kyselina	propanová kyselina	19,33				x
116	acyklický terpen ester	linalylester kyseliny mravenčí	19,40	x	x		
117	monocyklický terpen	<i>p</i> -menth-3-en	19,58	x			
118	monocyklický terpen ester	menthylacetát	19,62	x	x		
119	sírná sloučenina	ethylester kyseliny 3-(methylthio)propanové 2	19,81		x		
120	kyselina	2-methylpropanová kyselina	19,97				x
121	alkohol	2,3-butandiol 2	19,93		x		
122	monocyklický terpen alkohol	1-terpinenol	19,93		x	x	
123	bicyklický terpen	<i>cis</i> - α -bergamoten	20,16		x	x	
124	bicyklický terpen alkohol	fenchol	20,22			x	
125	monocyklický terpen	<i>cis</i> - β -elemen	20,31			x	
126	monocyklický terpen alkohol	menthol	20,43		x		x
127	bicyklický terpen	karyofylen 2	20,52		x	x	x
128	monocyklický terpen alkohol	4-terpineol	20,63	x	x	x	
129	ester	hexylester kyseliny hexanové	20,67				x
130	alkan	heneikosan 2	20,73		x		x
131	bicyklický terpen	bicykloseskvivifelandren	19,46			x	
132	monocyklický terpen	<i>cis</i> - β -elemen 2	20,61			x	
133	monocyklický terpen alkohol	β -terpineol	21,27	x	x	x	
134	ester	methylester kyseliny propanové	21,32				x
135	ester	ethylester kyseliny dekanové	21,36		x		
136	monocyklický terpen alkohol	menthol 2	21,47	x	x	x	x
137	kyselina	pentanová kyselina	23,26	x			
138	ester	methylester kyseliny mravenčí	21,57				x

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
139	ester	methylester kyseliny 2-oktynové	21,75	x			
140	ester	3-hexenylester kyseliny hexanové	21,76				x
141	furan	furfurylalkohol	22,05	x	x	x	x
142	bicyklický terpen	α -selinen	21,89			x	
143	ester	2-methylester kyseliny butanové	22,46	x			x
144	monocyklický terpen alkohol	β -terpineol 2	22,48			x	
145	acyklický terpen aldehyd	β-citral	22,58			x	x
146	bicyklický terpen	α -kadinen	23,36			x	
147	monocyklický terpen alkohol	α -terpineol	22,84	x	x	x	x
148	bicyklický terpen alkohol	borneol	22,81	x	x	x	x
149	bicyklický terpen	kadina-3,5-dien	18,01			x	
150	monocyklický terpen	β -bisabolen	23,57	x	x	x	x
151	acyklický terpen aldehyd	α-citral	23,76	x	x	x	x
152	acyklický terpen	α -farnesen	23,26		x	x	x
153	alkan	1-butyl-2-methylcyklopropan	24,16	x			
154	ester	3-hexenylester kyseliny heptanové	24,05				x
155	alkohol	1-dekanol	24,18			x	
156	acyklický terpen alkohol	citronellol	24,29	x			
157	bicyklický terpen	7-epi- α -selinen	23,39				x
158	monocyklický terpen alkohol	alfa-ionol	24,30				x
159	ester	3-hexenylester kyseliny mléčné	24,53				x
160	ester	3-hexenylester kyseliny mléčné 2	24,60				x
161	bicyklický terpen	3,7(11)-selinadien	24,82			x	
162	monocyklický terpen aldehyd	perillal	25,01			x	
163	ester	methylester kyseliny dodekanové	25,07	x	x		x
164	acyklický terpen alkohol	isogeraniol	25,06	x			
165	bicyklický terpen ester	<i>trans</i> -chrysanthenyl acetát	25,31			x	
166	bicyklický terpen ester	sabinylyl acetát	25,38			x	

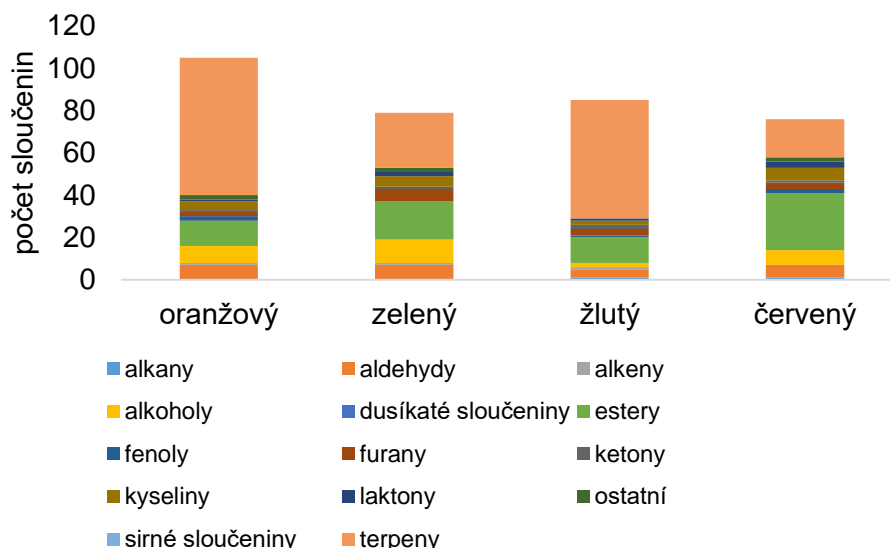
Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
167	monocyklický terpen ether	estragol	25,17		x		
168	monocyklický terpen	germakren B	25,91			x	
169	keton	korylon	25,91	x			
170	acyklický terpen alkohol	cis-geraniol	25,36	x	x	x	
171	terpen pyran	trans-rose oxid 3	26,07				x
172	acyklický terpen alkohol	trans-geraniol	26,09			x	
173	monocyklický terpen alkohol	p-cymen-8-ol	26,24		x	x	
174	monocyklický terpen keton	α-isomethylionon	26,30	x	x		
175	kyselina	hexanová kyselina	26,35	x	x		x
176	ester	3-hexenylester kyseliny oktanové	26,26				x
177	ester	undecylester kyseliny octové	26,42			x	
178	alkohol	benzylalkohol	26,92	x	x	x	x
179	ester	methylester kyseliny hexanové	28,67				x
180	monocyklický terpen alkohol	p-menth-1-en-9-ol	27,60			x	
181	alkohol	fenylethylalkohol	27,63	x			x
182	monocyklický terpen keton	β-ionon	28,17		x		
183	alkan	cyklododekan	28,54				x
184	alkohol	1-dodekanol	28,54	x	x	x	
185	kyselina	heptanová kyselina	28,63		x		
186	ostatní	1,1-diisobutoxy-isobutan	28,65		x		x
187	keton	maltol	28,93		x		
188	terpen epoxid	karyofylen oxid	29,14		x	x	
189	monocyklický terpen alkohol	p-mentha-1(7),8(10)-dien-9-ol	29,30			x	
190	ester	methylester kyseliny tetradekanové	29,41		x	x	
191	fenol	fenol	29,64	x	x		
192	keton	furaneol	30,09				x
193	aldehyd	4-methoxybenzaldehyd	30,12		x		
194	monocyklický terpen aldehyd	cinnamal	30,31	x	x	x	

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
195	monocyklický terpen alkohol	junenol	30,64			x	
196	kyselina	oktanová kyselina	30,69		x	x	x
197	monocyklický terpen alkohol	karveol	26,58			x	
198	monocyklický terpen alkohol	p-mentha-1,8-dien-7-ol	29,49			x	
199	ester	triacetin	29,85	x	x		
200	alkohol	triethylenglykol	30,38				x
201	bicyklický terpen	2,6,10,10-tetramethyl-1-oxaspiro[4.5]dec-6-en	31,40			x	
202	ester	methylcinnamát	31,06			x	
203	ester	cinnamylester kyseliny mravenčí	31,51		x		
204	ester	pentylester kyseliny salicylové	31,53			x	
205	ostatní	anhydrid propionové kyseliny	31,75				x
206	monocyklický terpenester	karvakrylester kyseliny octové	27,29			x	
207	ostatní	anhydrid propionové kyseliny 2	31,89				x
208	monocyklický terpen alkohol	trans-askaridol glykol	32,32			x	
209	alkohol	2-fenoxyethanol	32,27	x			
210	lakton	δ-dekalakton	32,35	x			x
211	alkohol	tetradekanol	32,53			x	
212	bicyklický terpen alkohol	δ-eudesmol	32,66			x	
213	monocyklický terpen alkohol	eugenol	32,82	x	x		
214	monocyklický terpen alkohol	thymol	33,02			x	
215	tricyklický terpen alkohol	isospathulenol	34,24			x	
216	kyselina	mléčná kyselina	32,63	x	x	x	
217	ester	monoacetin	33,55				x
218	alkohol	3-methyl-2-butanol	34,62		x		
219	monocyklický terpen alkohol	cinnamylalkohol	34,89	x	x	x	
220	alkohol	isopropylalkohol	35,41	x			
221	acyklický terpen alkohol	farnesol	35,39	x			x
222	acyklický terpen alkohol	farnesol 2	35,88	x	x		x

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
223	monocyklický terpen alkohol	trans-isoeugenol	35,76	x	x	x	
224	alkohol	hexadekanol	36,68				x
225	ester	decylester kyseliny dekanové	36,58	x			
226	ester	benzylcinnamát	36,77	x	x		
227	ester	triethylcitrát	38,17				x
228	lakton	kumarin	38,12	x	x	x	x
229	kyselina	dodekanová kyselina	38,12				x
230	ester	benzylbenzoát	40,65	x			
231	furan	5-hydroxymethylfurfural	38,82	x	x	x	x
232	ester	decylester kyseliny dekanové 2	40,14	x	x		
233	monocyklický terpen aldehyd	vanilín	40,32		x	x	
234	ester	benzylsalicylát	46,09	x			x
235	ester	benzylcinnamát	41,81	x	x	x	x
236	kyselina	tetradekanová kyselina	42,84		x		

4.2.2 Vzorky výrobce B (Česká republika)

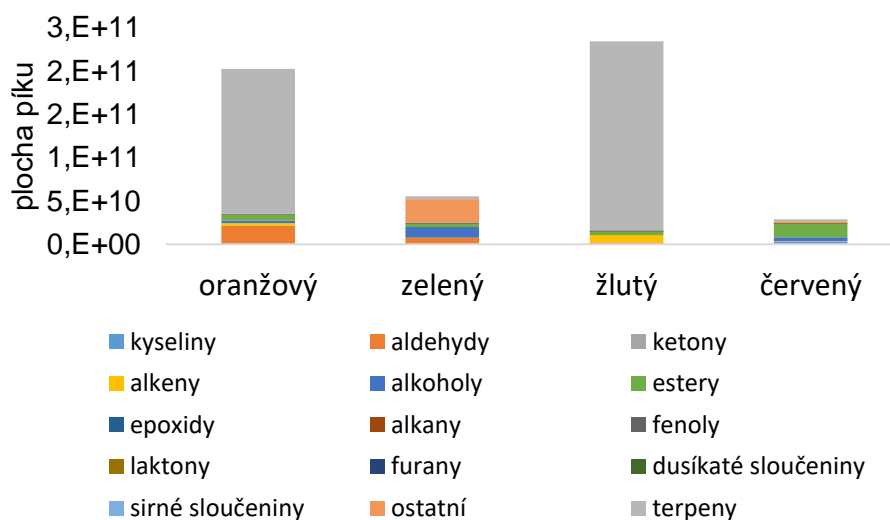
Ve vzorcích výrobce B bylo identifikováno 226 různých AAL, z nichž bylo 21 alergenních (včetně 3 izomerů). Srovnání jednotlivých skupin lze vidět v grafu 3. Celkový přehled identifikovaných těkavých látek je uveden v tabulce 14.



Graf 3: Srovnání počtu identifikovaných sloučenin podle chemických skupin ve vzorcích výrobce B

Z grafu 3 lze odečíst, že největší počet sloučenin byl nalezen ve vzorku oranžové barvy (105), více jak polovinu těchto látek tvořily terpeny (65). Podobný profil má také vzorek žluté barvy. U červeného vzorku převažovaly opět sloučeniny patřící do skupiny esterů (27 z celkově 76 sloučenin). Estery tvořily značnou část i u ostatních barev, u oranžového vzorku 12, u zeleného 18 a u žlutého 12.

Graf 4 zobrazuje zastoupení jednotlivých skupin v rámci obsahového složení. Z tohoto grafu je patrné, že největší množství látek bylo obsaženo ve vzorku žluté barvy, z nichž víc jak 80 % jsou terpeny; stejně tak u vzorku oranžového je obsahově více jak polovina tvořena terpeny. Zelený a červený vzorek má oproti těmto dvěma značně menší obsah AAL.



Graf 4: Srovnání obsahu identifikovaných sloučenin podle chemických skupin ve vzorcích výrobce B

Tabulka 14: Identifikované těkavé látky ve vzorcích výrobce B

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
1	ester	methyester kyseliny butanové	5,02				x
2	ester	isobutylacetát	5,51		x		
3	monocyklický terpen	α -pinen	5,63	x		x	
4	ester	ethylbutyrát	6,03	x	x	x	x
5	bicyklický terpen	kamfen	6,57			x	
6	aldehyd	hexanal	7,15		x		x
7	monocyklický terpen	β -pinen	7,68			x	x
8	monocyklický terpen	α -felandren	8,87	x		x	
9	ester	3-methylbutylester kyseliny octové	8,1		x		
10	keton	4-heptanon	8,15		x		
11	alkohol	butan-1-ol	8,6		x		
12	acyklický terpen	β -myrcen	9,19	x	x	x	x
13	monocyklický terpen	m-mentha-1,8-dien	9,47		x		
14	bicyklický terpen alkohol	sabinenhydrát	15,48			x	
15	alkan	dodekan	9,84				x
16	aldehyd	heptanal	9,77				x
17	monocyklický terpen	limonen	10,09	x	x	x	x
18	alkohol	3-methylbutanol	10,25		x		
19	monocyklický terpen ether	eukalyptol	10,33			x	
20	aldehyd	2-hexenal	10,75		x		x
21	ester	ethylester kyseliny hexanové	11,07				x
22	acyklický terpen	trans- β -ocimen	11,15	x			
23	monocyklický terpen	p-mentha-1,5,8-trien	10,93	x		x	
24	monocyklický terpen	terpinen	11,48	x	x	x	x
25	acyklický terpen	cis-ocimen	11,63	x		x	
26	ostatní	styren	11,79		x		x
27	monocyklický terpen	m-cymen	11,98			x	

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
28	ester	hexylester kyseliny octové	12,1		x		x
29	ester	3-hexenylacetát	13,29				x
30	monocyklický terpen	p-cymen	12,27	x		x	
31	alkan	2,6,11-trimethyldodekan	12,26				
32	monocyklický terpen	terpinolen	12,46	x		x	
33	ester	3-methylbutylester kyseliny pentanové	12,19		x		
34	bicyklický terpen	4-karen	12,4		x		x
35	aldehyd	oktanal	12,64	x		x	
36	ester	3-methylbutyl ester kyseliny 3-methylbutanové	12,63				x
37	alken	trans-4,8-dimethylnona-1,3,7-trien	13	x		x	
38	monocyklický terpen ester	β-terpinylacetát	13,41	x			
39	ostatní	4-methyl-2-pentyl-1,3-dioxalan	13,41		x		x
40	ester	2-hexenylacetát	13,73				x
41	keton	6-methyl-5-hepten-2-on	13,9			x	
42	ostatní	4-methyl-2-pentyl-1,3-dioxalan 2	14,01		x		x
43	alkohol	butanol	14,19	x			
44	alkohol	hexanol	14,19		x		x
45	aldehyd	melonal	14,28			x	
46	terpen pyran	trans-roseoxid	14,3			x	
47	ester	3-methylbutylester kyseliny 3-methylbutanové 2	14,38				x
48	ester	methyl 2-butenóát	14,45		x		
49	monocyklický terpen aldehyd	safranal	14,55			x	
50	monocyklický terpen alkohol	p-cymen-7-ol	14,6	x			
51	ester	heptylester kyseliny octové	14,81	x			
52	alkohol	cis-3-hexen-1-ol	15,04	x	x	x	x
53	alkan	tetradekan	15,13			x	

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
54	alkohol	3-oktanol	15,2		x		
55	aldehyd	nonanal	15,36	x		x	x
56	ester	ethylester kyseliny oktanové	16,33	x		x	
57	monocyklický terpen	1,3,8-p-menthatriene	15,7			x	
58	alkohol	2-hexen-1-ol	15,6		x		x
59	ester	hexylester kyseliny butanové	15,86				x
60	ester	cis-3-hexenyl- α -methylbutyrát	16,75				x
61	furan	2-ethylfuran	15,7		x		
62	kyselina	hexylester kyseliny 2-methyl propanové	15,83				x
63	ostatní	1,1-diethoxyoktan	21,19	x			
64	ester	hexylester kyseliny 2-methylbutanové	16,08				x
65	ostatní	4-methyl-2-(1-pentenyl)-1,3-dioxolan	16,19		x		x
66	monocyklický terpen	p-mentha-1,5,8-triene 2	16,27	x		x	
67	ester	ethylester kyseliny octové	15,54				x
68	ostatní	4-Methyl-2-(1-pentenyl)-1,3-dioxolan 2	16,46		x		
69	monocyklický terpen	p-cymen 2	16,55			x	
70	ostatní	4-Methyl-2-(1-pentenyl)-1,3-dioxolan 3	16,73		x		x
71	terpen epoxid	limonen-1,2-epoxid	16,76	x			
72	ostatní	4-Methyl-2-(1-pentenyl)-1,3-dioxolan 4	16,98		x		x
73	ester	3-hexenylester kyseliny butanové	17,02				x
74	terpen epoxid	limonen-1,2-epoxid 2	17,04	x		x	
75	bicyklický terpen alkohol	4-thujanol	17,11			x	
76	monocyklický terpen keton	trans-p-menthan-3-on	17,22	x	x	x	x
77	kyselina	octová kyselina	17,21			x	x
78	monocyklický terpen	γ -elemen	17,24			x	
79	furan	furfural	17,37		x	x	x
80	ester	trans-2-hexenyl ester kyseliny isovalerové	17,48				x
81	ester	oktylester kyseliny octové	17,4	x			

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
82	acyklický terpen aldehyd	citronellal	17,6	x		x	
83	alkohol	2-ethyl-1-hexanol	17,72		x		
84	ester	cis-3-hexenyl- α -methylbutyrát 2	18,31				x
85	bicyklický terpen	kadina-1,4-dien	17,25	x			
86	tricyklický terpen	α -kopaen	17,85	x			
87	monocyklický terpen keton	trans-p-menthan-3-on 2	17,94		x	x	x
88	aldehyd	dekanal	18,02		x	x	x
89	aldehyd	dekanal 2	18,17	x			
90	ostatní	2-tert-butyl-5-propyl-1,3-dioxolan-4-on	18,33		x		
91	tricyklický terpen	β -bourbonen	18,48			x	x
92	monocyklický terpen keton	2-bornanon	18,61			x	
93	alkohol	1-(2-methoxypropoxy)-2-propanol	18,63		x		x
94	ostatní	2-heptyl-4-methyl-1,3-dioxolan	17,41	x			
95	aldehyd	benzaldehyd	18,97		x		x
96	bicyklický terpen	cis-murola-4(14),5-dien	19,02	x			
97	acyklický terpen alkohol	linalool	19,18	x	x		x
98	terpen furan	rosefuran	16,1			x	
99	alkohol	oktanol	19,42	x			x
100	monocyklický terpen ester	menthylacetát	19,62	x	x		x
101	bicyklický terpen	cis- α -bergamoten	19,9			x	
102	monocyklický terpen alkohol	piperitol	19,75	x			
103	monocyklický terpen alkohol	neoisopulegol	19,82		x		x
104	monocyklický terpen ester	isopulegolacetát	19,92	x			
105	monocyklický terpen alkohol	terpinenol	19,93	x		x	
106	furan	5-methylfurfural	20,11		x		
107	bicyklický terpen	cis- α -bergamoten 2	20,16	x		x	
108	monocyklický terpen	cis- β -elemen	20,31	x		x	
109	bicyklický terpen	karyofylen	20,52	x		x	
110	monocyklický terpen alkohol	4-terpineol	20,63			x	

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
111	ester	hexylester kyseliny hexanové	20,67				x
112	aldehyd	undekanal	20,64	x			
113	bicyklický terpen	bicykloeskvielandren	19,46	x			
114	ester	ethyllevulinát	20,86		x		x
115	ester	ethylester kyseliny 2,4-dimethyl-1,3-dioxolan-2-octové	20,99				x
116	monocyklický terpen alkohol	β -terpineol	21,27	x		x	
117	ester	ethylester kyseliny dekanové	21,36	x			
118	ester	ethylester kyseliny 2,4-dimethyl-1,3-dioxolan-2-octové 2	21,27				x
119	monocyklický terpen alkohol	menthol	21,47	x	x	x	x
120	aldehyd	2-dekenal	21,65	x			
121	ester	3-hexenylester kyseliny hexanové	21,76		x		x
122	alkohol	nonanol	21,86	x			
123	furan	furfurylalkohol	22,05	x	x		x
124	monocyklický terpen	β -seskvifelandren	23,52			x	
125	aldehyd	2-butyl-2-oktenal	22,11		x		
126	monocyklický terpen alkohol	cis-p-mentha-2,8-dien-1-ol	21,97	x			
127	alken	1,5,9,9-Tetramethyl-1,4,7-cykloundecatrien	22,25			x	
128	kyselina	2-methylbutanová kyselina	22,35				x
129	ester	vertenex	22,39		x		
130	acyklický terpen aldehyd	β-citral	22,58	x	x	x	x
131	monocyklický terpen alkohol	α -terpineol	22,84	x	x	x	x
132	furan	1-(2-furanyl)-ethanon	22,97			x	
133	ester	α -methylbenzyl acetát	23,01				x
134	aldehyd	dodekanal	23,11	x			
135	bicyklický terpen	kadina-1(6),4-dien	23,31			x	
136	monocyklický terpen	β -bisabolen	23,57		x		

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
137	ester	benzylester kyseliny octové	23,67				x
138	bicyklický terpen	α -muurolen	23,22	x			
139	acyklický terpen aldehyd	α-citral	23,76	x	x	x	
140	monocyklický terpen keton	karvon	23,84	x			
141	acyklický terpen	α -farnesen	23,26	x			
142	acyklický terpen ester	geranyl acetát	24,1			x	
143	ester	ethylester kyseliny 2,4-dimethyl-1,3-dioxalan-2-propanové	24,01				x
144	bicyklický terpen	kadina-1(10),4-dien	24,2	x	x		
145	alkohol	dekanol	24,18				x
146	acyklický terpen alkohol	citronellol	24,29	x		x	
147	monocyklický terpen ester	methylsalicylát	24,84				x
148	monocyklický terpen aldehyd	perillal	25,01	x	x	x	
149	keton	1-(2,6,6-trimethylcyklohex-1-en-1-yl)but-2-en-1-on	25,56				x
150	ester	fenylester kyseliny octové	25,6	x			
151	monocyklický terpen ether	estragol	25,17			x	
152	monocyklický terpen alkohol	cis-karveol	25,93	x			
153	acyklický terpen alkohol	cis-geraniol	25,36	x	x	x	
154	monocyklický terpen alkohol	6-epi-shyobunol	26,51	x			
155	monocyklický terpen ether	cis-anethol	25,89			x	
156	acyklický terpen alkohol	trans-geraniol	26,09	x		x	
157	monocyklický terpen keton	karvon 2	26,21	x			
158	monocyklický terpen alkohol	p-cymen-8-ol	26,24			x	
159	kyselina	hexanová kyselina	26,35		x		x
160	monocyklický terpen ester	perilla acetát	26,71	x		x	
161	monocyklický terpen alkohol	karveol 2	26,58	x		x	

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
162	ester	fenylmethylester kyseliny 2-methylbutanové	26,67				x
163	aldehyd	2-n-butyl-2-oktenal	26,73		x		
164	alkohol	benzylalkohol	26,92	x	x		x
165	tricyklický terpen alkohol	kubebol	27,67	x			
166	alkohol	cis-4-dodekenol	27,2	x			
167	ester	methylester kyseliny hexanové	28,67		x		
168	aldehyd	tetradekanal	27,7	x			
169	monocyklický terpen keton	piperitenon	27,95	x		x	
170	alkohol	fenylethylalkohol	27,63				
171	monocyklický terpen alkohol	p-menth—1-en-9-ol	27,6	x		x	
172	monocyklický terpen keton	β-ionon	28,17				x
173	alken	3-methoxyhex-1-en	28,31		x		
174	kyselina	2-ethylhexanová kyselina	28,45		x		
175	alkohol	dodekanol	28,54	x	x	x	
176	kyselina	heptanová kyselina	28,63		x		
177	kyselina	2-hexenová kyselina	29,09		x		x
178	terpen epoxid	karyofylen oxid	29,14	x		x	
179	monocyklický terpen alkohol	p-mentha-1(7),8(10)-dien-9-ol	29,3	x			
180	ester	methylester kyseliny tetradekanové	29,41	x			
181	monocyklický terpen alkohol	p-mentha-1,8-dien-7-ol	29,49	x		x	
182	furan	2,5-diethyltetrahydrofuran	29,57		x		
183	fenol	fenol	29,64				x
184	ester	isopropylester kyseliny tetradekanové	29,91			x	
185	acyklický terpen alkohol	trans-nerolidol	30,02	x			
186	keton	furaneol	30,09				x
187	aldehyd	4-methoxybenzaldehyd	30,12		x		
188	fenol	4-ethyl-2-methoxy-fenol	30,07	x			

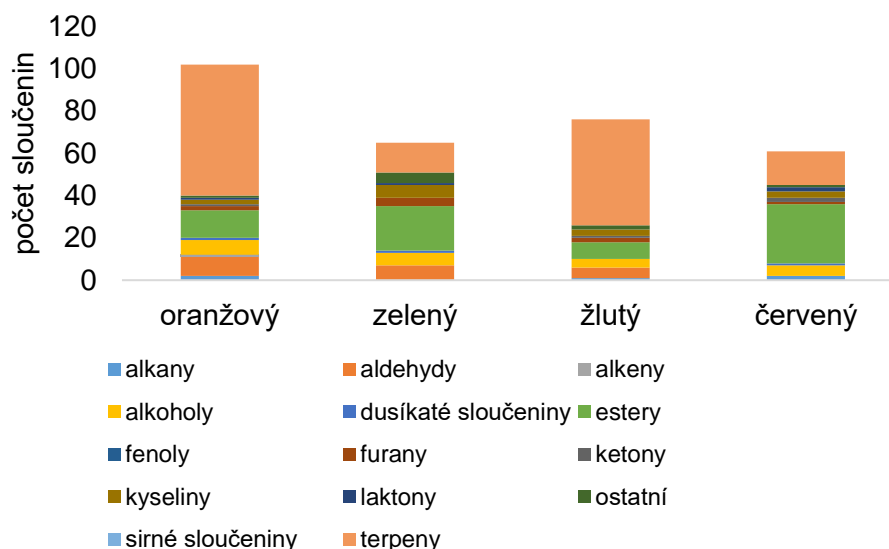
Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
189	bicyklický terpen	2,6,10,10-tetramethyl-1-oxaspiro[4.5]dec-6-en	31,4	x			
190	monocyklický terpen aldehyd	lilial	30,29		x		
191	monocyklický terpen aldehyd	cinnamal	30,31	x	x	x	x
192	monocyklický terpen keton	methyl-β-ionon	30,64		x		
193	kyselina	oktanová kyselina	30,69	x			
194	bicyklický terpen keton	kar-3-en-5-on	29,74	x		x	
195	ester	triacetin	29,85	x	x	x	x
196	monocyklický terpen alkohol	hedykaryol	30,92	x			
197	ester	methylcinnamát	31,06		x		x
198	fenol	p-kresol	31,12	x		x	
199	monocyklický terpen alkohol	p-menthan-1,8-diol	31,25	x			
200	tricyklický terpen alkohol	spathulenol	31,81	x			
201	alkohol	2-fenoxyethanol	32,27	x	x		
202	monocyklický terpen alkohol	trans-askaridol glykol	32,32			x	
203	lakton	δ-dekalakton	32,35		x		x
204	bicyklický terpen alkohol	δ-eudesmol	32,66	x			
205	monocyklický terpen alkohol	eugenol	32,82	x	x	x	x
206	ester	methyester kyseliny hexadekanové	33,36	x	x	x	
207	alkohol	1,2,5,5,8a-pentamethyl-1,2,3,5,6,7,8,8a-oktahydronaftalen-1-ol	32,82	x			
208	bicyklický terpen alkohol	kadinol	33,2	x			
209	monocyklický terpen alkohol	thymol	33,02	x		x	
210	bicyklický terpen alkohol	α-eudesmol	33,67	x			
211	ester	monoacetin	33,55			x	
212	acyklický terpen aldehyd	sinensal	33,77	x			

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
213	ester	methyl ester kyseliny 3-hydroxyoktadekanové	33,88			x	
214	ester	monoacetin 2	34,02			x	
215	monocyklický terpen keton	AR-turmeron	33,91		x	x	
216	monocyklický terpen alkohol	limonen-1,2-diol	34,52	x		x	
217	keton	4-hexen-3-on	34,37	x		x	
218	kyselina	N-dekanová kyselina	34,67	x	x		x
219	ester	kharismal	34,78		x		
220	monocyklický terpen alkohol	cinnamylalkohol	34,89	x			
221	acyklický terpenalkan	sinensal 2	35,59	x			
222	acyklický terpenA	farnesol 1	35,39				x
223	acyklický terpenA	farnesol 2	35,88	x	x		x
224	kyselina	3,7-dimethylokta-2,6-dienová kyselina	35,88	x		x	
225	monocyklický terpen alkohol	trans-iso Eugenol	35,76	x			
226	monocyklický terpen aldehyd	hexylcinnamal	36,16		x		
227	lakton	δ-dodekalakton	36,11				x
228	ester	triethylcitrát	38,17	x	x	x	x
229	lakton	kumarin	38,12	x	x	x	x
230	monocyklický terpen aldehyd	lyral	38,21		x		
231	ester	benzylbenzoát	40,65	x	x		
232	furan	5-hydroxymethylfurfural	38,8	x	x	x	x
233	bicyklický terpenketon	nootkaton	39,2	x			
234	ester	decylester kyseliny dekanové	40,14				x
235	monocyklický terpen aldehyd	vanilín	40,32		x		
236	fenol	p-tert-pentyl-fenol	43,25				x
237	ester	benzylsalicylát	46,09		x	x	x

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
238	ester	benzylcinnamát	41,81	x	x	x	x
239	kyselina	tetradekanová kyselina	42,84	x			

4.2.3 Vzorky výrobce C (Polsko)

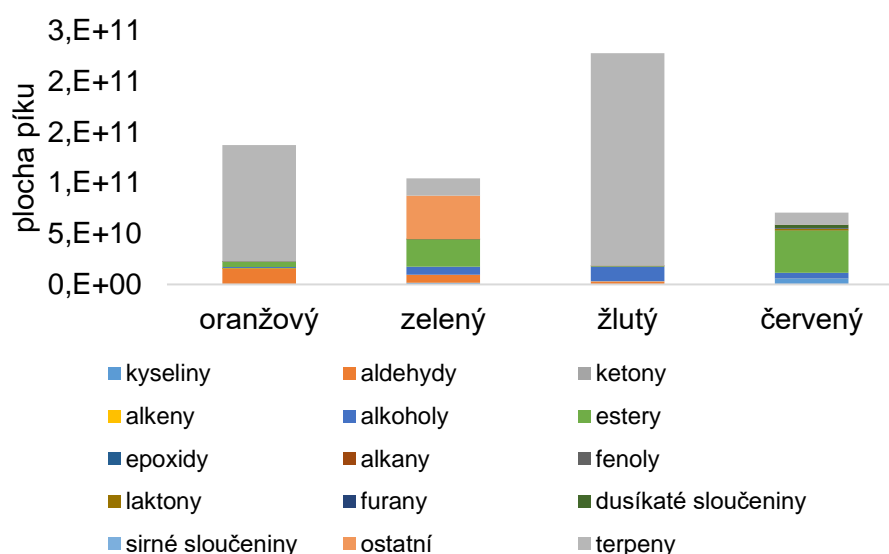
Ve vzorcích výrobce C bylo identifikováno 190 různých AAL, z nichž bylo 20 alergenních (včetně 3 izomerů). Srovnání jednotlivých skupin lze vidět v grafu 5. Celkový přehled identifikovaných AAL je uveden v tabulce 15.



Graf 5: Srovnání počtu identifikovaných sloučenin podle chemických skupin ve vzorcích výrobce C

Jak lze vidět v grafu 5, u vzorků oranžové a žluté barvy převažovaly terpeny (u oranžového 62 ze 102, u žlutého 50 ze 76 sloučenin celkem), zatímco u vzorků zeleného a červeného to byly estery (u zeleného 21 z 65, u červeného 28 z 61). V oranžovém vzorku bylo identifikováno nejvíce AAL (101), nejméně bylo opět u vzorku červené barvy (61).

Z grafu 6 lze odečíst, že vzorky žluté a oranžové barvy obsahovaly i větší množství AAL, u obou případů byla velká část opět tvořena terpeny. Vzorek zelené a červené barvy obsahoval z větší části AAL patřící mezi estery.



Graf 6: Srovnání obsahu identifikovaných sloučenin podle chemických skupin ve vzorcích výrobce C

Tabulka 15: Identifikované těkavé látky ve vzorcích C

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
1	ester	methylester kyseliny 2-methylbutanové	5,45				x
2	monocyklický terpen	α -pinen	5,63	x		x	
3	ester	ethylbutyrát	6,03	x	x		
4	ester	methylester kyseliny 2-methylbutanové 2	6,36				x
5	aldehyd	hexanal	7,15		x		
6	monocyklický terpen	β -pinen	7,68	x		x	
7	bicyklický terpen	sabinen	7,93	x		x	
8	monocyklický terpen	α -felandren	8,87			x	
9	ester	3-methylbutylester kyseliny octové	8,1		x		x
10	ester	ethylester kyseliny pentanové	8,38				x
11	alkohol	butanol	8,6		x		
12	monocyklický terpen	α -pinen	8,78	x			
13	acyklický terpen	β -myrcen	9,19	x		x	x
14	bicyklický terpen alkohol	4-thujanol	15,48	x		x	
15	keton	heptan-2-on	9,66				x
16	alkan	dodekan	9,84				x
17	ester	isopentylester kyseliny propionové	9,83		x		
18	monocyklický terpen	limonen	10,09	x	x	x	x
19	monocyklický terpen	1,3,8-p-menthatrien	10,82	x			
20	aldehyd	2-hexenal	10,75		x		
21	ester	ethylester kyseliny hexanové	11,07				x
22	ester	ethylester kyseliny hexanové 2	11				x
23	monocyklický terpen	terpinen	11,48	x	x	x	
24	acyklický terpen	cis-ocimen	11,63	x			
25	ester	2-heptylacetát	11,78		x		
26	monocyklický terpen	m-cymen	11,98	x			

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
27	ester	hexylester kyseliny octové	12,1		x		
28	monocyklický terpen	p-cymen	12,27	x		x	
29	ester	β-hexenylformiát	14,04				x
30	monocyklický terpen	terpinolen	12,46	x		x	
31	alkan	tridekan	12,44				x
32	aldehyd	oktanal	12,64	x	x	x	
33	alken	trans-4,8-dimethylnona-1,3,7-trien	13	x			
34	monocyklický terpen ester	β-terpinylacetát	13,41	x			
35	ostatní	4-methyl-2-pentyl-1,3-dioxalan	13,41		x	x	x
36	bicyklický terpen	3-karen	13,6	x			
37	ester	ethylester kyseliny heptanové	13,66				x
38	ester	hexylester kyseliny propanové	13,83		x		
39	keton	6-methyl-5-hepten-2-on	13,9	x		x	
40	ester	ethylaktát	14,01				x
41	ostatní	4-methyl-2-pentyl-1,3-dioxalan 2	14,01		x	x	
42	alkohol	hexanol	14,19		x	x	x
43	monocyklický terpen aldehyd	safranal	14,55			x	
44	monocyklický terpen alkohol	p-cymen-7-ol	14,6	x			
45	ester	heptylester kyseliny octové	14,81	x			
46	alkohol	cis-3-hexen-1-ol	15,04				x
47	alkan	tetradekan	15,13	x		x	
48	aldehyd	nonanal	15,36	x	x	x	
49	ester	ethylester kyseliny oktanové	16,33	x			x
50	monocyklický terpen	1,3,8-p-menthatrien 2	15,7	x			
51	ester	hexylester kyseliny butanové	15,86		x	x	
52	ester	ethylester kyseliny 2-methyloktanové	16,01				x
53	ester	ethylester kyseliny 2-hydroxy-3-methylbutanové	16,17				x

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
54	ostatní	4-methyl-2-(1-pentenyl)-1,3-dioxolan	16,19		x		
55	alkan	hexadekan	15,69	x			
56	aldehyd	trans-2-oktenal	16,38	x			
57	ester	ethyl ester kyseliny octové	15,54	x			
58	ostatní	4-Methyl-2-(1-pentenyl)-1,3-dioxolan 2	16,46		x		
59	ostatní	4-Methyl-2-(1-pentenyl)-1,3-dioxolan 3	16,73		x		
60	terpen epoxid	limonen-1,2-epoxid	16,76	x		x	
61	ostatní	4-Methyl-2-(1-pentenyl)-1,3-dioxolan 4	16,98		x	x	
62	terpen epoxid	limonen-1,2-epoxid 2	17,04	x			
63	bicyklický terpen alkohol	4-thujanol 2	17,11			x	
64	monocyklický terpen keton	trans-p-menthan-3-on	17,22				x
65	furan	furfural	17,37			x	x
66	ester	oktylester kyseliny octové	17,4	x			
67	acyklický terpen aldehyd	citronellal	17,6	x		x	
68	ester	3-hexenylester kyseliny valerové	17,68				x
69	ester	cis-3-hexenyl- α -methylbutyrát	18,31				x
70	tricyklický terpen	α -kopaen	17,85	x			
71	aldehyd	dekanal	18,02	x	x	x	
72	aldehyd	dekanal 2	18,17	x			
73	ostatní	2-tert-butyl-5-propyl-1,3-dioxolan-4-on	18,33		x		
74	monocyklický terpen keton	2-bornanon	18,61	x		x	
75	alkohol	1-(2-methoxypropoxy)-2-propanol	18,63				
76	alkohol	butan-2-ol	18,63		x		
77	ostatní	2-heptyl-4-methyl-1,3-dioxolan	17,41	x	x		
78	aldehyd	benzaldehyd	18,97	x	x	x	
79	ester	ethylester kyseliny nonanové	18,91				x
80	acyklický terpen alkohol	linalool	19,18	x	x	x	x
81	aldehyd	3,7-dimethyl-3,6-oktadienal	19,91			x	
82	Terpen furan	rosefuran	16,1			x	

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
83	alkohol	oktanol	19,42	x	x	x	
84	monocyklický terpen ester	menthylacetát	19,62		x	x	x
85	tricyklický terpen alkohol	teresantalol	19,65	x			
86	bicyklický terpen	cis- α -bergamoten	19,9			x	
87	monocyklický terpen alkohol	neoisopulegol	19,82	x			
88	bicyklický terpen	cis- α -bergamoten 2	20,16	x		x	
89	monocyklický terpen	cis- β -elemen	20,31	x			
90	bicyklický terpen	karyofylen	20,52	x		x	
91	monocyklický terpen alkohol	4-terpineol	20,63			x	
92	ester	hexylester kyseliny hexanové	20,67		x		x
93	aldehyd	undekanal	20,64	x			
94	monocyklický terpen keton	dihydrokarvon	20,88	x			
95	bicyklický terpen	bicykloeskivifelandren	19,46	x			
96	monocyklický terpen alkohol	p-2,8-menthadien-1-ol	21,04	x		x	
97	ester	methylester kyseliny propionové	21,32		x		
98	acyklický terpen keton	tageton	21,33	x			
99	ester	ethylester kyseliny dekanové	21,36				x
100	monocyklický terpen alkohol	menthol	21,47		x		x
101	kyselina	pentanová kyselina	23,26		x		
102	ester	3-hexenylfenylacetát	21,79				
103	bicyklický terpen	9-epi-karyofylen	21,62				x
104	aldehyd	2-dekenal	21,65	x	x		
105	ester	3-hexenylester kyseliny hexanové	21,76				x
106	bicyklický terpen	santen	22,63			x	
107	alkohol	nonanol	21,86	x			
108	ester	methylester kyseliny octové	21,93	x			
109	acyklický terpen ester	citronellol acetát	21,96			x	
110	furan	furfurylalkohol	22,05	x	x		
111	monocyklický terpen alkohol	p-2,8-menthadien-1-ol 2	21,97	x	x		

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
112	monocyklický terpen	humulen	22,54			x	
113	bicyklický terpen	α -selinen	21,89			x	
114	ester	3-methylbutanová kyselina	22,46		x		
115	acyklický terpen aldehyd	β-citral	22,58	x	x	x	
116	monocyklický terpen alkohol	α -terpineol	22,84	x	x	x	x
117	ester	α -methylbenzyl acetát	23,01				x
118	aldehyd	dodekanal	23,11	x			
119	bicyklický terpen	kadina-3,5-dien	18,01	x			
120	monocyklický terpen	β -bisabolen	23,57	x		x	
121	ester	benzylester kyseliny octové	23,67				x
122	acyklický terpen ester	nerol acetát	23,53	x		x	
123	acyklický terpen aldehyd	α-citral	23,76	x	x	x	
124	monocyklický terpen keton	karvon	23,84	x			
125	ostatní	anhydrid kyseliny butanové	23,91		x		
126	acyklický terpen	α -farnesen	23,26	x		x	
127	acyklický terpen ester	geranyl acetát	24,1	x		x	
128	ester	3-hexenylester kyseliny heptanové	24,05				x
129	bicyklický terpen	kadina-1(10),4-dien	24,2	x			
130	acyklický terpen alkohol	citronellol	24,29	x	x	x	x
131	ester	3-hexenylester kyseliny mléčné	24,53		x		x
132	monocyklický terpen aldehyd	perillal	25,01	x		x	
133	alkohol	α -fenylethanol	25,48				x
134	acyklický terpen alkohol	isogeraniol	25,06	x			
135	ester	triacetin	25,48		x		
136	ester	fenylester kyseliny octové	25,6				x
137	monocyklický terpen alkohol	cis-karveol	25,93	x		x	
138	acyklický terpen alkohol	cis-geraniol	25,36	x	x	x	x
139	ester	ethylester kyseliny dodekanové	25,92				x

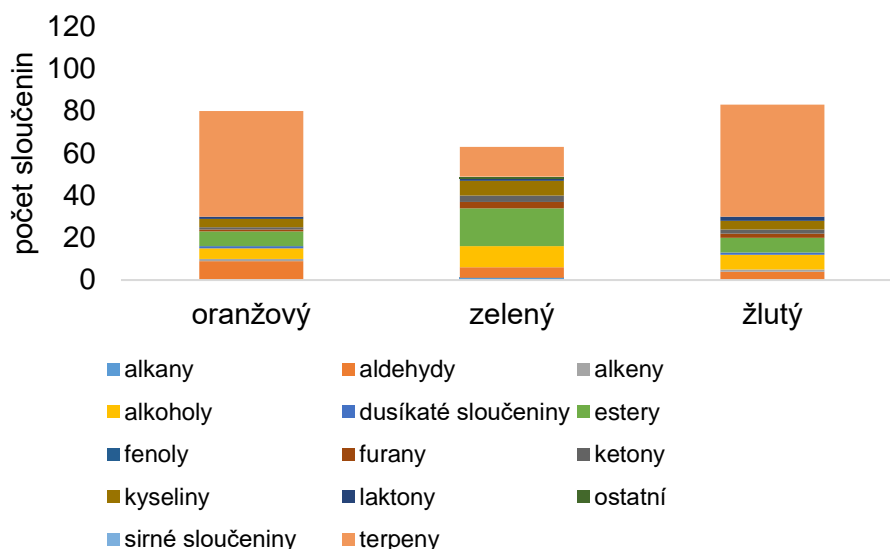
Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
140	acyklický terpen alkohol	trans-geraniol	26,09	x		x	x
141	monocyklický terpen alkohol	p-cymen-8-ol	26,24			x	
142	monocyklický terpen keton	α-isomethylionon	26,3				x
143	kyselina	hexanová kyselina	26,35		x	x	
144	kyselina	hexanová kyselina 2	26,36		x		
145	monocyklický terpen ester	perilla acetát	26,71	x			
146	monocyklický terpen alkohol	karveol 2	26,58	x		x	
147	kyselina	2-methylhexanová kyselina	26,74				x
148	alkohol	benzylalkohol	26,92	x	x	x	
149	tricyklický terpen alkohol	kubebol	27,67	x			
150	alkohol	cis-4-dodekenol	27,2	x			
151	ester	methylester kyseliny hexanové	28,67		x		
152	aldehyd	tetradekanal	27,7	x			
153	monocyklický terpen keton	piperitenon	27,95	x		x	
154	alkohol	fenylethylalkohol	27,63				x
155	monocyklický terpen alkohol	p-menth—1-en-9-ol	27,6	x			
156	kyselina	2-ethylhexanová kyselina	28,45		x		
157	alkohol	dodekanol	28,54	x			
158	kyselina	heptanová kyselina	28,63			x	x
159	alkohol	4,8-Dimethyl-3,7-nonadien-2-ol	29,05			x	
160	kyselina	2-hexenová kyselina	29,09		x		
161	terpen epoxid	karyofylen oxid	29,14	x		x	
162	monocyklický terpen alkohol	p-mentha-1(7),8(10)-dien-9-ol	29,3	x		x	
163	ester	methylester kyseliny tetradekanové	29,41				x
164	monocyklický terpen alkohol	p-mentha-1,8-dien-7-ol	29,49	x		x	
165	furan	2,5-diethyltetrahydrofuran	29,57		x		
166	acyklický terpen alkohol	trans-nerolidol	30,02	x			
167	keton	furaneol	30,09				x

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
168	monocyklický terpen aldehyd	cinnamal	30,31	x	x	x	x
169	kyselina	oktanová kyselina	30,69				x
170	bicyklický terpen keton	kar-3-en-5-on	29,74			x	
171	ester	triacetin 2	29,85	x		x	
172	monocyklický terpen alkohol	hedykaryol	30,92	x			
173	ester	methylcinnamát	31,06	x	x	x	x
174	ester	ethylcinnamát	32,06		x		
175	alkohol	2-fenoxyethanol	32,27	x	x		
176	monocyklický terpen alkohol	trans-askaridol glykol	32,32			x	
177	laktón	δ-dekalakton	32,35	x	x		x
178	alkohol	tetradekanol	32,53				x
179	monocyklický terpen alkohol	eugenol	32,82				x
180	kyselina	nonanová kyselina	32,76	x	x	x	
181	ester	methyester kysleiny hexadekanové	33,36		x		
182	monocyklický terpen alkohol	thymol	33,02			x	
183	ester	monoacetin	33,55		x	x	
184	acyklický terpen aldehyd	sinensal	33,77	x			
185	ester	monoacetin 2	34,02			x	
186	dusíkatá sloučenina	methyl 2-aminobenzoát	34,13	x	x		x
187	monocyklický terpen alkohol	limonen-1,2-diol	34,52	x		x	
188	monocyklický terpen aldehyd	amylcinnamal	34,39				x
189	kyselina	N-dekanová kyselina	34,67	x	x		
190	ester	kharismal	34,78		x		
191	monocyklický terpen alkohol	cinnamylalkohol	34,89			x	
192	acyklický terpen alkohol	trans-geranylgeraniol	35,4	x			
193	acyklický terpen aldehyd	α-sinensal	35,60	x			
194	acyklický terpen alkohol	farnesol 1	35,39	x	x		

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
195	acyklický terpen alkohol	farnesol 2	35,88	x	x		
196	monocyklický terpen alkohol	trans-isoeugenol	35,76			x	
197	monocyklický terpen aldehyd	hexylcinnamal	36,16	x	x	x	x
198	lakton	δ-dodekalakton	36,11				x
199	ester	triethylcitrát	38,17	x	x	x	
200	lakton	kumarin	38,12	x	x	x	x
201	ester	benzylbenzoát	40,65	x			x
202	furan	5-hydroxymethylfurfural	38,8	x	x	x	
203	bicyklický terpen keton	nootkaton	39,2	x			
204	ester	decylester kyseliny dekanové	40,14	x			
205	ester	benzylsalicylát	46,09	x	x	x	x
206	ester	benzylcinnamát	41,81		x	x	x

4.2.4 Vzorky výrobce D (Německo)

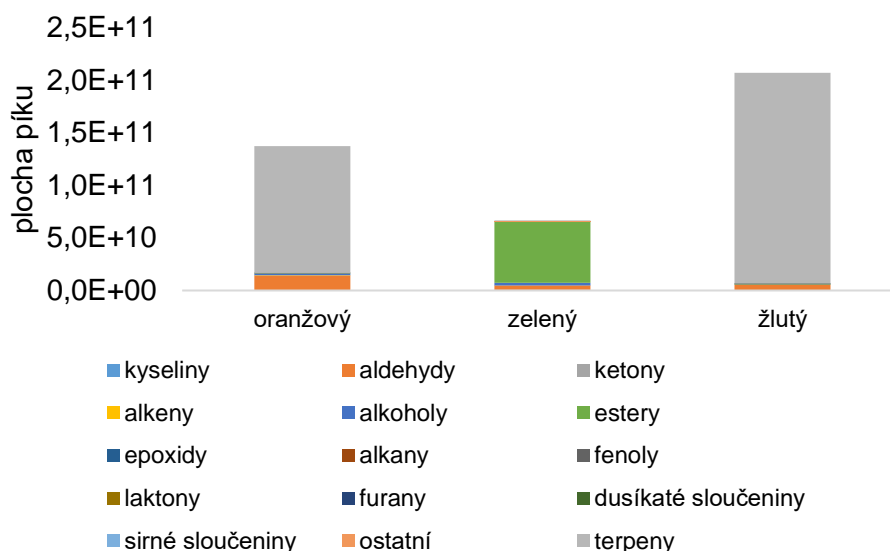
Ve vzorcích výrobce D bylo identifikováno 155 různých AAL, z nichž bylo 17 alergenních (včetně dvou izomerů). Srovnání jednotlivých skupin lze vidět v grafu 7. Celkový přehled identifikovaných AAL je uveden v tabulce 16.



Graf 7: Srovnání počtu identifikovaných sloučenin podle chemických skupin ve vzorcích výrobce D

Jak lze vidět v grafu 7, největší počet identifikovaných sloučenin byl ve vzorku oranžové (80) a žluté barvy (83); u obou byla více jak polovina těchto sloučenin tvořena terpeny (u oranžového 50, u žlutého 53). V zeleném vzorku bylo identifikováno 63 sloučenin; největší část tvořily estery (18) a poté terpeny (14).

U porovnání obsahu jednotlivých sloučenin, jak lze odečíst z grafu 8, bylo největší množství sloučenin obsaženo ve vzorku žluté barvy, u kterého převažovaly z více jak 90 % terpeny. U vzorku oranžové barvy byla většina látek také tvořena terpeny. Zelený vzorek obsahoval nejmenší množství AAL, zde převážnou část tvořily estery.



Graf 8: Srovnání obsahu identifikovaných sloučenin podle chemických skupin ve vzorcích výrobce D

Tabulka 16: Identifikované těkavé látky ve vzorcích D

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý
1	ester	methylester kyseliny 2-methylbutanové	5,45		x	
2	monocyklický terpen	α -pinen	5,63	x		x
3	ester	methylester kyseliny 2-methylbutanové 2	6,36		x	
4	aldehyd	hexanal	7,15	x	x	
5	monocyklický terpen	β -pinen	7,68	x		x
6	bicyklický terpen	sabinen	7,93		x	x
7	monocyklický terpen	α -felandren	8,87	x	x	
8	ester	3-methylbutylester kyseliny octové	8,1		x	
9	acyklický terpen	β -myrcen	9,19	x	x	x
10	keton	3,4-hexandion	9,34		x	
11	ester	pentylester kyseliny octové	9,42		x	
12	alkan	dodekan	9,84		x	
13	monocyklický terpen	limonen	10,09	x	x	x
14	aldehyd	2-hexenal	10,75		x	
15	ester	ethylester kyseliny hexanové	11,07		x	
16	acyklický terpen	trans- β -ocimen	11,15			x
17	monocyklický terpen	terpinen	11,48		x	x
18	ester	pentylester kyseliny butanové	12,92	x		x
19	acyklický terpen	cis-ocimen	11,63	x		x
20	monocyklický terpen	m-cymen	11,98	x		
21	ester	hexylester kyseliny octové	12,1		x	
22	ester	3-hexenylacetát	13,29		x	
23	monocyklický terpen	p-cymen	12,27	x		x
24	ester	β -hexenyl propionát	15,05		x	
25	alkohol	2,6-dimethyl-oktan-2-ol	15,21		x	
26	monocyklický terpen	terpinolen	12,46	x		x

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý
27	ester	3-methylbutylester kyseliny pentanové	12,19			
28	aldehyd	oktanal	12,64	x		x
29	alkohol	heptanol	16,82			x
30	alken	trans-4,8-dimethylnona-1,3,7-trien	13	x		x
31	tricyklický terpen alkohol	teresantalol	19,65	x		
32	ester	2-hexenylacetát	13,73		x	
33	keton	6-methyl-5-hepten-2-on	13,9	x		x
34	alkohol	hexanol	14,19		x	x
35	aldehyd	melonal	14,28			x
36	monocyklický terpen aldehyd	safranal	14,55			x
37	kyselina	kyselina máselná	21,61		x	
38	ester	heptylester kyseliny octové	14,81	x		
39	alkohol	3-oktanol	15,2		x	
40	aldehyd	nonanal	15,36	x		x
41	acyklický terpen aldehyd	hydroxycitronellal	22,02	x		
42	ester	ethylester kyseliny oktanové	16,33	x	x	
43	ester	hexylester kyseliny butanové	15,86		x	
44	furan	2-ethylfuran	15,7		x	
45	terpen furan	perillen	16,06	x		
46	monocyklický terpen	p-mentha-1,5,8-trien	16,27			x
47	aldehyd	trans-2-oktenal	16,38	x		
48	terpen epoxid	limonen-1,2-epoxid	16,76	x		x
49	ester	3-hexenylester kyseliny butanové	17,02		x	
50	terpen epoxid	limonen-1,2-epoxid 2	17,04	x		x
51	monocyklický terpen	γ-elemen	17,24			x
52	furan	furfural	17,37			x
53	ester	oktylester kyseliny octové	17,4	x	x	
54	acyklický terpen aldehyd	citronellal	17,6	x		x

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý
55	tricyklický terpen	α-kopaen	17,85	x		
56	aldehyd	dekanal	18,02	x	x	x
57	acyklický terpen aldehyd	exo-isocitral	17,07			x
58	alkohol	1-(2-methoxypropoxy)-2-propanol	18,63		x	
59	aldehyd	benzaldehyd	18,97	x	x	
60	bicyklický terpen	cis-muurola-4(14),5-dien	19,02	x		
61	acyklický terpen alkohol	linalool	19,18	x	x	x
62	acyklický terpen aldehyd	isogeranial	19,91			x
63	Terpen furan	rosefuran	16,1			x
64	alkohol	oktanol	19,42	x	x	x
65	bicyklický terpen	cis-α-bergamoten	19,9			x
66	monocyklický terpen alkohol	Neo-isopulegol	19,82	x		
67	monocyklický terpen alkohol	isopulegol 2	19,91	x		
68	monocyklický terpen	cis-β-elemen	20,31	x		x
69	bicyklický terpen	karyofylen	20,52	x		x
70	monocyklický terpen alkohol	4-terpineol	20,63			x
71	aldehyd	undekanal	20,64	x		
72	monocyklický terpen keton	dihydrokarvon	20,88	x		
73	ester	ethyllevulinát	20,86			x
74	keton	3-methyl-2-butanon	21		x	
75	monocyklický terpen alkohol	p-2,8-menthadien-1-ol	21,04	x		
76	monocyklický terpen alkohol	β-terpineol	21,27			x
77	ester	ethylester kyseliny dekanové	21,36			
78	monocyklický terpen alkohol	menthol	21,47	x	x	x
79	kyselina	pentanová kyselina	23,26		x	
80	ester	3-hexenylfenylacetát	21,79		x	
81	aldehyd	2-dekenal	21,65	x		
82	alkohol	nonanol	21,86	x		
83	acyklický terpen ester	citronellol acetát	21,96	x		

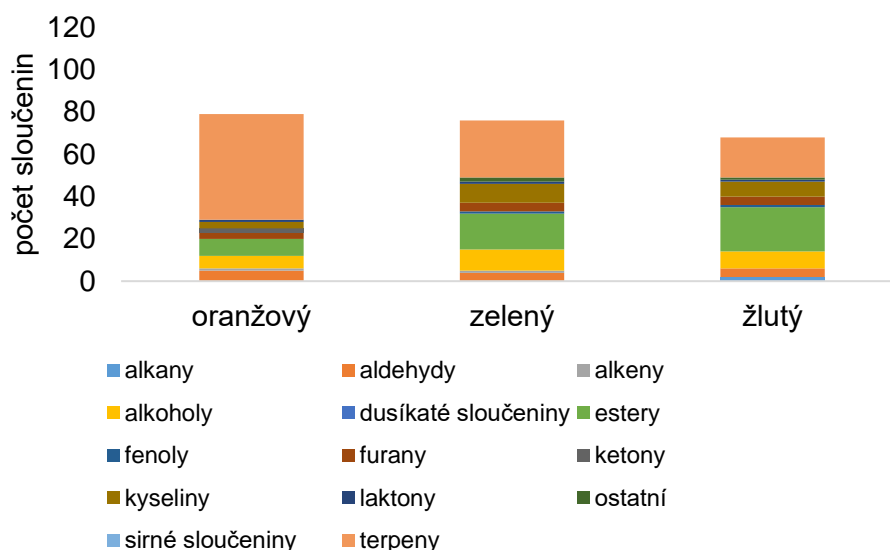
Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý
84	furan	furfurylalkohol	22,05	x	x	x
85	monocyklický terpen alkohol	p-2,8-menthadien-1-ol 2	21,97	x		
86	monocyklický terpen	humulen	22,54			x
87	bicyklický terpen	α-selinen	21,89	x		
88	acyklický terpen aldehyd	β-citral	22,58	x	x	x
89	bicyklický terpen	α-kadinen	23,36			x
90	monocyklický terpen alkohol	α-terpineol	22,84	x	x	x
91	aldehyd	dodekanal	23,11	x	x	
92	bicyklický terpen	kadina-3,5-dien	18,01	x		
93	acyklický terpen ester	nerol acetát	23,53			x
94	acyklický terpen aldehyd	α-citral	23,76	x	x	x
95	monocyklický terpen keton	karvon	23,84	x		
96	acyklický terpen	α-farnesen	23,26			x
97	acyklický terpen ester	geranyl acetát	24,1	x		x
98	bicyklický terpen	kadina-1(10),4-dien	24,2	x		
99	acyklický terpen alkohol	citronellol	24,29	x		
100	bicyklický terpen	7-epi-α-selinen	23,39	x		
101	monocyklický terpen ester	methylosalicylát	24,84			x
102	monocyklický terpen aldehyd	perillal	25,01	x		x
103	acyklický terpen alkohol	isogeraniol	25,06			x
104	monocyklický terpen alkohol	cis-karveol	25,93	x		x
105	acyklický terpen alkohol	cis-geraniol	25,36	x		x
106	acyklický terpen alkohol	trans-geraniol	26,09	x		x
107	monocyklický terpen alkohol	p-cymen-8-ol	26,24			x
108	ostatní	4-methyl-2-fenyl-1,3-dioxalan	26,27		x	
109	kyselina	hexanová kyselina	26,35		x	
110	monocyklický terpen ester	perilla acetát	26,71	x		
111	monocyklický terpen alkohol	karveol	26,58	x		x

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý
112	kyselina	2-methylhexanová kyselina	26,74			x
113	alkohol	benzylalkohol	26,92	x	x	x
114	tricyklický terpen alkohol	kubebol	27,67	x		
115	ester	methylester kyseliny hexanové	28,67			x
116	keton	4-fenyl-3-buten-2-on	27,43		x	
117	monocyklický terpen keton	piperitenon	27,95	x		x
118	alkohol	fenylethylalkohol	27,63		x	x
119	alkohol	dodekanol	28,54	x	x	
120	kyselina	heptanová kyselina	28,63	x	x	
121	kyselina	2-hexenová kyselina	29,09		x	
122	terpen epoxid	karyofylen oxid	29,14	x		x
123	monocyklický terpen alkohol	p-mentha-1(7),8(10)-dien-9-ol	29,3	x		x
124	ester	methylester kyseliny tetradekanové	29,41		x	
125	monocyklický terpen alkohol	p-mentha-1,8-dien-7-ol	29,49	x		x
126	acyklický terpen alkohol	trans-nerolidol	30,02	x		
127	bicyklický terpen	2,6,10,10-tetramethyl-1-oxaspiro[4.5]dec-6-en	31,4			x
128	monocyklický terpen aldehyd	cinnamal	30,31		x	
129	kyselina	oktanová kyselina	30,69	x		
130	bicyklický terpen keton	kar-3-en-5-on	29,74			x
131	bicyklický terpen keton	kar-3-en-5-on 2	30,7			x
132	monocyklický terpen alkohol	hedykaryol	30,92	x		
133	ester	methylcinnamát	31,06	x		x
134	tricyklický terpen alkohol	spathulenol	31,81			x
135	keton	dihydrojasmon	31,91			x
136	bicyklický terpen alkohol	neoisothujol	32,05			x
137	alkohol	2-fenoxyethanol	32,27	x	x	x
138	lakton	δ-dekalakton	32,35			x

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý
139	alkohol	tetradekanol	32,53			x
140	monocyklický terpen alkohol	karvakrol	32,93			x
141	kyselina	nonanová kyselina	32,76	x	x	x
142	ester	methyester kyseliny hexadekanové	33,36		x	x
143	monocyklický terpen alkohol	thymol	33,02			x
144	ester	monoacetin	33,55		x	
145	acyklický terpen aldehyd	sinensal	33,77	x		
146	ester	methyl ester kyseliny 3-hydroxyoktadekanové	33,88		x	
147	ester	monoacetin 2	34,02		x	
148	dusíkatá sloučenina	methyl 2-aminobenzoát	34,13	x		x
149	monocyklický terpen alkohol	limonen-1,2-diol	34,52			x
150	monocyklický terpen aldehyd	amylcinnamal	34,39		x	
151	kyselina	N-dekanová kyselina	34,67	x	x	x
152	acyklický terpen alkohol	farnesol	35,88		x	
153	kyselina	3,7-dimethylocta-2,6-dienová kyselina	35,88			x
154	monocyklický terpen aldehyd	hexylcinnamal	36,16	x	x	x
155	alkohol	hexadekanol	36,68		x	
156	lakton	δ-dodekalakton	36,11			x
157	lakton	kumarin	38,12	x	x	
158	monocyklický terpen aldehyd	lyral	38,21	x		
159	furan	5-hydroxymethylfurfural	38,8		x	
160	ester	benzylsalicylát	46,09			x
161	ester	benzylcinnamát	41,81	x	x	x

4.2.5 Vzorky výrobce E (Česká republika)

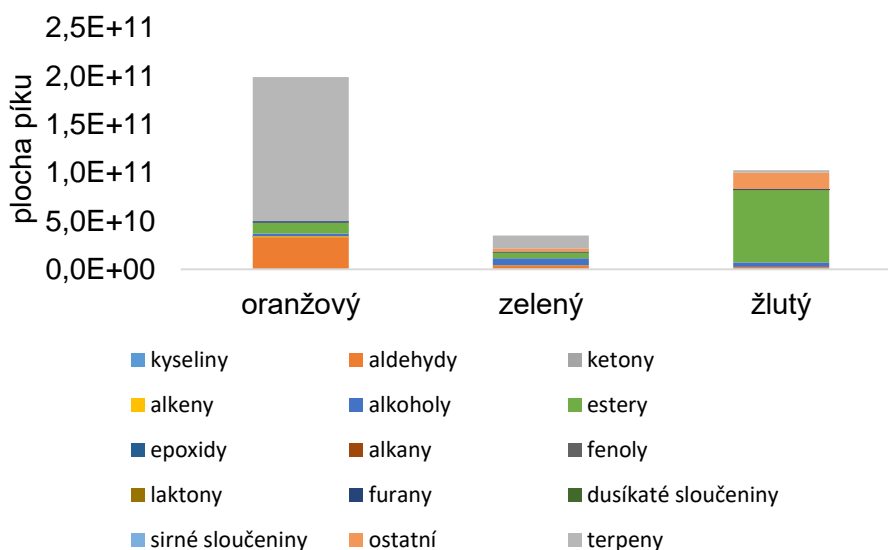
Ve vzorcích výrobce E bylo identifikováno 146 různých AAL, z nichž bylo 18 alergenních (včetně 2 izomerů). Srovnání jednotlivých skupin lze vidět v grafu 9. Celkový přehled identifikovaných AAL je uveden v tabulce 17.



Graf 9: Srovnání počtu identifikovaných sloučenin podle chemických skupin ve vzorcích výrobce E

Jak lze odečíst z grafu 9 vzorky oranžové a zelené barvy obsahovaly podobný počet identifikovaných sloučenin (79 a 76). Žlutý vzorek obsahoval látek jen o něco méně (68). U oranžového vzorku tvořily velkou část opět terpeny (50), vzorek zelené barvy tvořily z velké části také terpeny (27), ale také estery (17). U žlutého vzorku byla velká část tvořena estery (21) a terpeny (19).

Z grafu 10 lze vidět, že co se týče obsahu, největší množství sloučenin bylo ve vzorku oranžové barvy, většina z nich byla opět tvořena terpeny a také nezanedbatelným množstvím aldehydů. Nejmenší množství sloučenin obsahoval zelený vzorek. Žlutý vzorek byl z velké části tvořen estery (73 %).



Graf 10: Srovnání obsahu identifikovaných sloučenin podle chemických skupin ve vzorcích výrobce E

Tabulka 17: Identifikované těkavé látky ve vzorcích E

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý
1	ester	ethylbutyrát	6,03	x	x	x
2	ester	ethylester kyseliny 3-methylbutanové	6,75		x	
3	ester	butylester kyseliny octové	6,88		x	
4	aldehyd	hexanal	7,15		x	
5	monocyklický terpen	α-felandren	8,87	x		
6	ester	3-methylbutylester kyseliny octové	8,1			x
7	alkohol	butanol	8,6		x	
8	ester	2-methylpropylester kyseliny butanové	9,1			x
9	acyklický terpen	β-myrcen	9,19	x		
10	alkan	dodekan	9,84			x
11	monocyklický terpen	limonen	10,09	x	x	x
12	monocyklický terpen ether	eukalyptol	10,33		x	x
13	aldehyd	2-hexenal	10,75		x	x
14	ester	ethylester kyseliny hexanové	11,07	x	x	
15	monocyklický terpen	terpinen	11,48	x	x	
16	acyklický terpen	cis-ocimen	11,63	x		
17	monocyklický terpen	m-cymen	11,98	x		
18	ester	hexylester kyseliny octové	12,1		x	x
19	ester	3-hexenylacetát	13,29		x	
20	ester	β-hexenylformiát	14,04	x		
21	monocyklický terpen	terpinolen	12,46	x		
22	bicyklický terpen	4-karen	12,4	x	x	
23	aldehyd	oktanal	12,64	x		
24	alken	trans-4,8-dimethylnona-1,3,7-trien	13,08	x	x	
25	monocyklický terpen ester	β-terpinylacetát	13,41	x		
26	ostatní	4-methyl-2-pentyl-1,3-dioxalan	13,41		x	
27	tricyklický terpen alkohol	teresantalol	19,65	x		

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý
28	ester	propylester kyseliny propanové	13,88			x
29	keton	6-methyl-5-hepten-2-on	13,9	x		
30	ostatní	4-methyl-2-pentyl-1,3-dioxalan 2	14,01		x	
31	alkohol	hexanol	14,19	x	x	x
32	monocyklický terpen alkohol	p-cymen-7-ol	14,6	x		
33	kyselina	kyselina máselná	21,61		x	x
34	acyklický terpen	neo-allo-ocimen	14,04	x		
35	ester	heptylester kyseliny octové	14,81	x		x
36	alkohol	cis-3-hexen-1-ol	15,04		x	
37	alkan	tetradekan	15,13			x
38	ester	methylester kyseliny oktanové	15,24			x
39	aldehyd	nonanal	15,36	x	x	x
40	ester	ethylester kyseliny oktanové	16,33			x
41	alkohol	2-hexen-1-ol	15,6		x	x
42	ester	butylester kyseliny hexanové	15,74		x	
43	ester	hexylester kyseliny butanové	15,86		x	x
44	furan	2-ethylfuran	15,7			x
45	terpen furan	perillen	16,06	x		
46	ester	hexylester kyseliny 2-methylbutanové	16,08		x	
47	ostatní	4-methyl-2-(1-pentenyl)-1,3-dioxolan	16,19		x	
48	ostatní	4-Methyl-2-(1-pentenyl)-1,3-dioxolan 2	16,46		x	x
49	ostatní	4-Methyl-2-(1-pentenyl)-1,3-dioxolan 3	16,73		x	x
50	terpen epoxid	limonen-1,2-epoxid	16,76	x		
51	ostatní	4-Methyl-2-(1-pentenyl)-1,3-dioxolan 4	16,98			x
52	terpen epoxid	limonen-1,2-epoxid 2	17,04	x		
53	acyklický terpen alkohol	2,6-dimethyl-7-okten-2-ol	17,13		x	
54	furan	furfural	17,37	x	x	x
55	ester	oktylester kyseliny octové	17,4	x		
56	acyklický terpen aldehyd	citronellal	17,6	x		

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý
57	alkohol	2-ethyl-1-hexanol	17,72		x	x
58	tricyklický terpen	α-kopaen	17,85	x	x	
59	aldehyd	dekanal	18,02	x	x	x
60	ester	1,2-propanediol diacetát	18,48			x
61	alkohol	1-(2-methoxypropoxy)-2-propanol	18,63		x	x
62	aldehyd	benzaldehyd	18,97			x
63	bicyklický terpen	cis-muurola-4(14),5-dien	19,02	x		
64	acyklický terpen alkohol	linalool	19,18	x	x	x
65	alkohol	oktanol	19,42	x		x
66	monocyklický terpen alkohol	isopulegol	19,91	x		
67	furan	5-methylfurfural	20,11		x	
68	monocyklický terpen	cis-β-elemen	20,31	x		
69	bicyklický terpen	karyofylen	20,52	x		
70	monocyklický terpen alkohol	4-terpineol	20,63	x	x	
71	monocyklický terpen aldehyd	dihydrokarvon	20,88	x		
72	monocyklický terpen	cis-β-elemen 2	20,61			x
73	monocyklický terpen alkohol	cis-p-mentha-2,8-dien-1-ol	21,04	x	x	
74	ester	ethylester kyseliny dekanové	21,36		x	x
75	monocyklický terpen alkohol	menthol	21,47		x	x
76	kyselina	pentanová kyselina	23,26		x	
77	aldehyd	2-dekenal	21,65	x		
78	alkohol	nonanol	21,86	x		
79	tricyklický terpen ester	cedryl acetát	21,92		x	
80	furan	furfurylalkohol	22,05	x	x	x
81	monocyklický terpen	β-seskvifelandren	23,52		x	
82	monocyklický terpen alkohol	cis-p-mentha-2,8-dien-1-ol 2	21,97	x		
83	monocyklický terpen	humulen	22,54		x	
84	acyklický terpen aldehyd	β-citral	22,58	x	x	x

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R_t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý
85	monocyklický terpen alkohol	α -terpineol	22,84	x	x	
86	aldehyd	dodekanal	23,11	x		
87	bicyklický terpen	kadina-3,5-dien	18,01	x		
88	monocyklický terpen	zingiberen	23,36			x
89	monocyklický terpen	β -bisabolen	23,57	x		
90	acyklický terpen aldehyd	α-citral	23,76	x	x	x
91	monocyklický terpen keton	karvon	23,84	x		
92	bicyklický terpen	kadina-1(10),4-dien	24,2	x	x	
93	acyklický terpen alkohol	citronello	24,29	x		
94	monocyklický terpen	α -kurkumen	24,57		x	x
95	ester	3-hexenylester kyseliny mléčné	24,53		x	
96	monocyklický terpen aldehyd	perillal	25,01	x	x	
97	monocyklický terpen alkohol	cis-karveol	25,93	x	x	
98	acyklický terpen alkohol	cis-geraniol	25,36	x	x	
99	ester	ethylester kyseliny 2,4-dekadienové	26,11			x
100	acyklický terpen alkohol	trans-geraniol	26,09	x	x	
101	kyselina	hexanová kyselina	26,35		x	
102	monocyklický terpen ester	perilla acetát	26,71	x		
103	monocyklický terpen alkohol	karveol 2	26,58	x		
104	alkohol	benzylalkohol	26,92	x	x	x
105	alkohol	cis-4-dodekenol	27,2	x		
106	ester	methylester kyseliny hexanové	28,67			x
107	ester	butylester kyseliny 4-oxopentanové	27,3		x	
108	monocyklický terpen keton	piperitenon	27,95	x		
109	monocyklický terpen keton	β -ionon	28,17	x		
110	alkohol	dodekanol	28,54		x	x
111	kyselina	heptanová kyselina	28,63		x	x
112	kyselina	2-hexenová kyselina	29,09			x

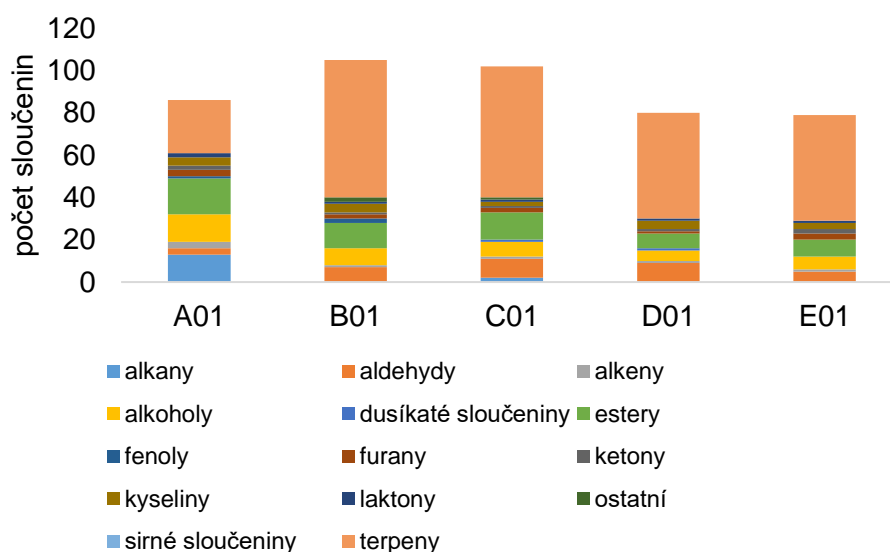
Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý
113	terpen epoxid	karyofylen oxid	29,14	x		
114	monocyklický terpen alkohol	p-mentha-1(7),8(10)-dien-9-ol	29,3	x	x	
115	ester	methylester kyseliny tetradekanové	29,41			x
116	monocyklický terpen alkohol	p-mentha-1,8-dien-7-ol	29,49	x		
117	fenol	fenol	29,64		x	x
118	acyklický terpen alkohol	trans-nerolidol	30,02	x		
119	monocyklický terpen aldehyd	cinnamal	30,31			x
120	monocyklický terpen keton	methyl-β-ionon	30,64			x
121	ester	methylcinnamát	31,06		x	x
122	tricyklický terpen alkohol	spathulenol	31,81	x		
123	alkohol	2-fenoxyethanol	32,27	x	x	x
124	alkohol	tetradekanol	32,53		x	
125	monocyklický terpen alkohol	eugenol	32,82			x
126	kyselina	nonanová kyselina	32,76	x	x	x
127	monocyklický terpen keton	δ-atlanton	32,85	x		
128	ester	methylester kyseliny hexadekanové	33,36		x	x
129	monocyklický terpen alkohol	thymol	33,02	x		
130	kyselina	mléčná kyselina	32,63		x	x
131	ester	monoacetin	33,55			x
132	acyklický terpen aldehyd	sinensal	33,77	x	x	
133	monocyklický terpen keton	AR-turmeron	33,91	x	x	x
134	monocyklický terpen keton	kurlon	34,13		x	x
135	monocyklický terpen alkohol	limonen-1,2-diol	34,52	x		
136	monocyklický terpen aldehyd	amylcinnamal	34,39			x
137	keton	4-hexen-3-on	34,37	x		
138	kyselina	N-dekanová kyselina	34,67	x	x	x
139	ester	kharismal	34,78	x		

Č.	Skupina	Název sloučeniny	Průměrný R _t [min]	Oranžový	Zelený	Žlutý
140	monocyklický terpen alkohol	cinnamylalkohol	34,89			x
141	acyklický terpen aldehyd	α-sinensal	35,60	x		
142	monocyklický terpen alkohol	trans-isoeugenol	35,76			x
143	monocyklický terpen aldehyd	hexylcinnamal	36,16	x	x	x
144	ester	triethylcitrát	38,17			x
145	lakton	kumarin	38,12	x	x	x
146	kyselina	dodekanová kyselina	38,41	x	x	x
147	ester	benzylbenzoát	40,65			x
148	furan	5-hydroxymethylfurfural	38,8	x	x	x
149	bicyklický terpen keton	nootkaton	39,2	x		
150	ester	decylester kyseliny dekanové	40,14		x	
151	monocyklický terpen aldehyd	vanilín	40,32			x
152	ester	benzylsalicylát	46,09	x	x	x
153	ester	benzylcinnamát	41,81	x	x	x
154	kyselina	tetradekanová kyselina	42,84		x	

4.3 Srovnání počtu a obsahu identifikovaných sloučenin ve vzorcích od různých výrobců

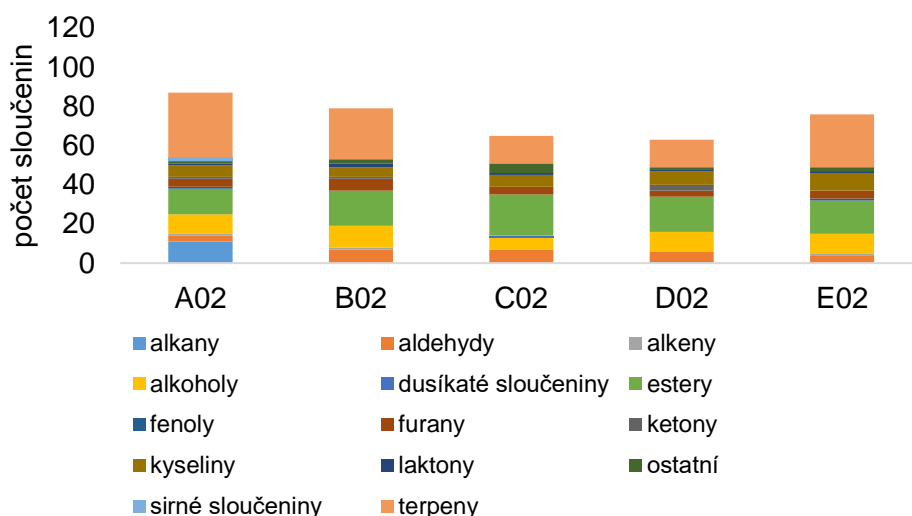
Jedním z cílů této práce bylo posouzení rozdílů mezi vzorky stejného typu od různých výrobců. V následujících grafech je uvedeno porovnání počtu (grafy 11 až 14) a obsahu (grafy 15 až 18) AAL mezi vzorky. I přesto, že jsou pro výrobu používány z velké části stejné suroviny (viz tabulka 7), z výsledků jsou patrné rozdíly mezi vzorky.

Graf 11 zobrazuje srovnání sloučenin ve vzorcích oranžové barvy. Nejvíce sloučenin bylo identifikováno ve vzorku B (105) a C (102). Jak je patrné z grafu, profil AAL byl u všech vzorků kromě vzorku A velmi podobný. Více jak 50 % těchto látek tvořily terpeny, dále estery, aldehydy a také alkoholy. U vzorku výrobce A velkou část tvořily jak terpeny (29 %), tak také estery (20%), alkoholy (15 %) a navíc také alkany (15%).



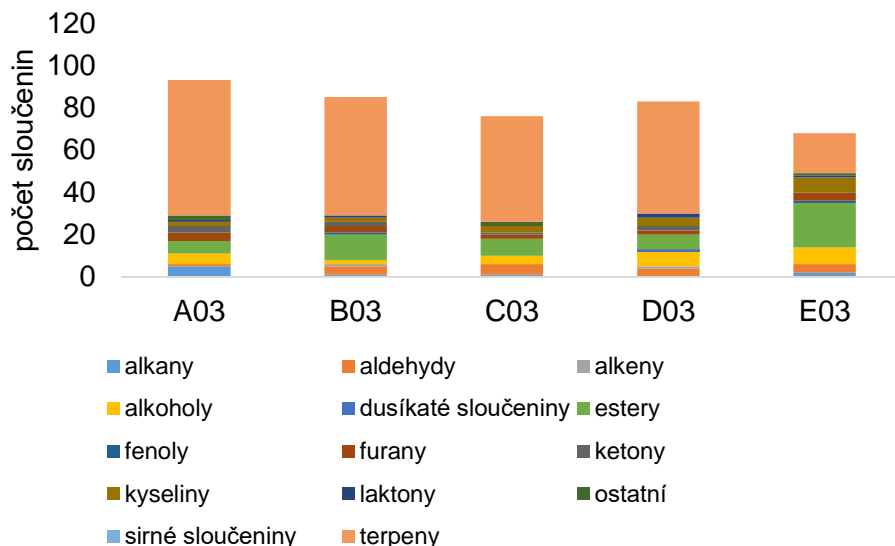
Graf 11: Srovnání počtu identifikovaných sloučenin podle chemických skupin u vzorků oranžové barvy; značení vzorků viz kapitola 3.2

V grafu 12 je zobrazeno porovnání skupin ve vzorcích zelené barvy. Vzorky výrobce B a E mají velmi podobný profil (celkem sloučenin u vzorku B 79 a u vzorku E 76), který je tvořen z velké části terpeny (u B 26, u E 27), dále estery a alkoholy. U vzorku C a D je vyšší zastoupení esterů (u C 21, u D 18) jak terpenů (u C i D 14) a dále je zde také značné množství alkoholů (u B 11 u D 10). Vzorek výrobce A se opět od ostatních výrobců viditelně liší, největší část tvoří terpeny (33), estery (13), alkoholy (10) a navíc také alkany (11).



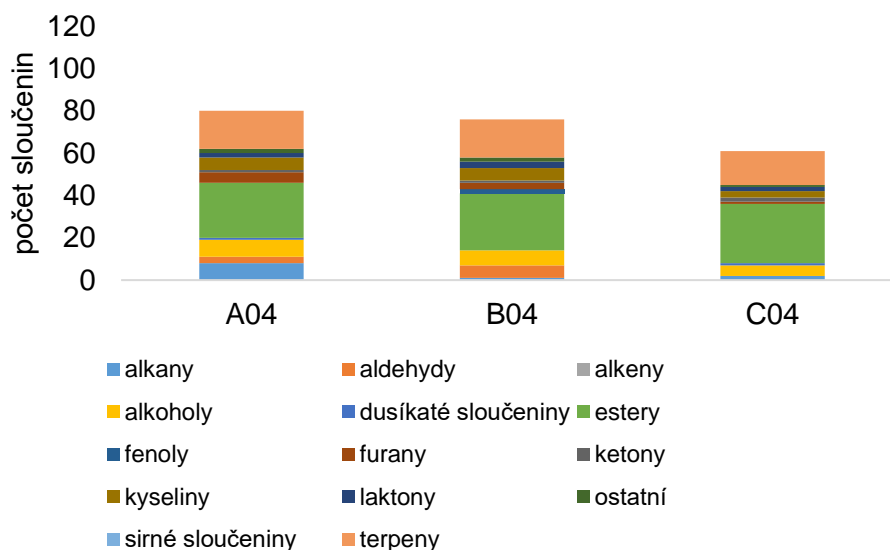
Graf 12: Srovnání počtu identifikovaných sloučenin podle chemických skupin u vzorků zelené barvy; značení vzorků viz kapitola 3.2

Graf 13 znázorňuje srovnání skupin u vzorků žluté barvy. Jak lze vidět v grafu, u vzorků výrobce A až D převažují u identifikovaných AAL terpeny (u A 64, B 56, C 50 a D 53), u vzorku výrobce E to jsou estery (21). Aromatický profil vzorku výrobce E je dále tvořen také terpeny (19) a alkoholy (8). Vzorky C a D mají složení velmi podobné, po terpenech zaujímají větší část estery (u C 8, D 7), alkoholy (u C 4 u D 7) a aldehydy (u C 5 u D 4). Vzorek výrobce A má oproti ostatním opět větší množství alkanů (5).



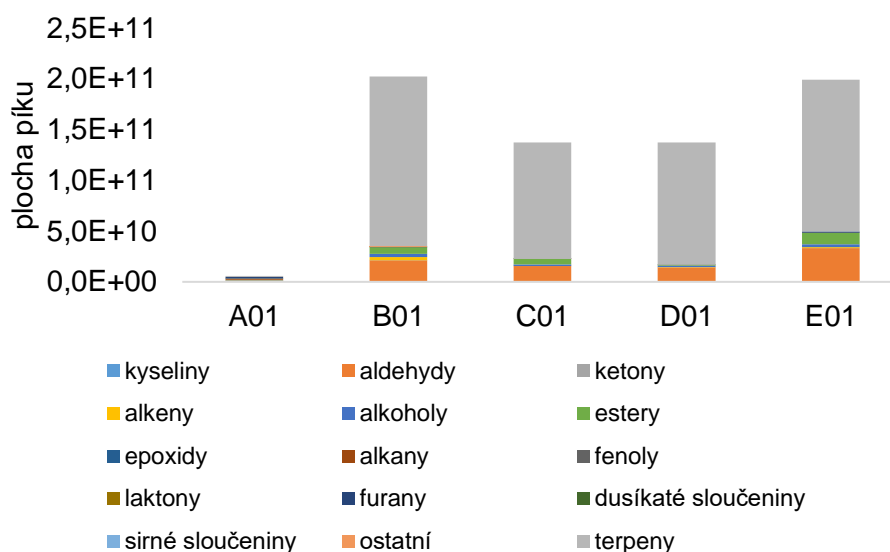
Graf 13: Srovnání počtu identifikovaných sloučenin podle chemických skupin u vzorků žluté barvy; značení vzorků viz kapitola 3.2

Graf 14 zobrazuje zastoupení jednotlivých skupin u vzorků červené barvy. Jak je patrné z grafu, u všech vzorků převažovaly estery (u A 26, B 27, C 28), poté terpeny (u A a B 18, u C 16) a alkoholy (u A 8, B 7, C 5). U vzorků A a B bylo identifikováno také značné množství kyselin (u A i B 6). Vzorek výrobce B má oproti ostatním vyšší množství aldehydů (6). Jako i u ostatních barev, tak i u této se vzorek výrobce A od ostatních odlišuje značným množstvím alkanů (8).



Graf 14: Srovnání počtu identifikovaných sloučenin podle chemických skupin u vzorků červené barvy; značení vzorků viz kapitola 3.2

V grafu 15 je zobrazeno srovnání obsahu identifikovaných sloučenin podle chemických skupin u vzorků oranžové barvy. Jak lze vidět v grafu, největší množství sloučenin obsahovaly vzorky B a E, naopak znatelně méně se vyskytovalo ve vzorku A. Kromě vzorku A, u kterého

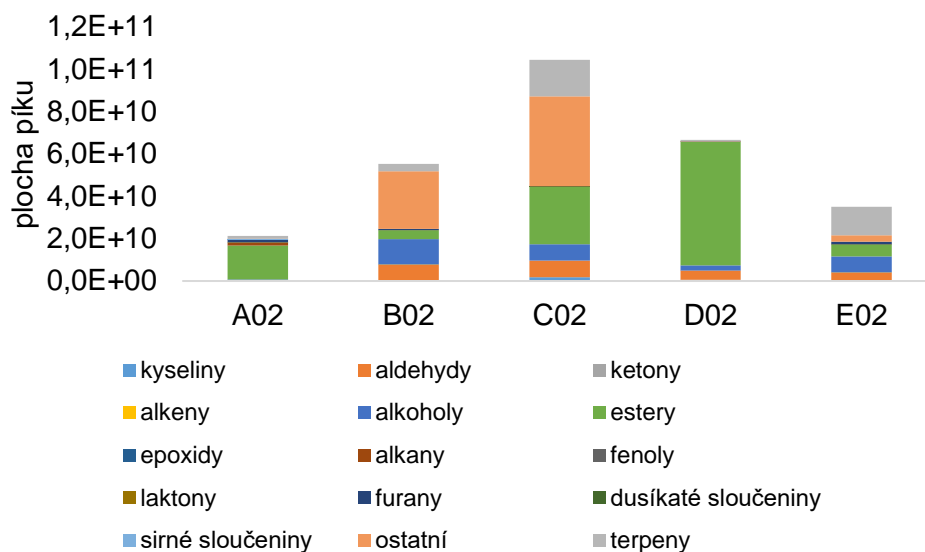


Graf 15: Srovnání množství identifikovaných sloučenin podle chemických skupin u vzorků oranžové barvy; značení vzorků viz kapitola 3.3

tvořily terpeny necelých 15 %, byla většina tohoto množství tvořena terpeny a dále aldehydy.

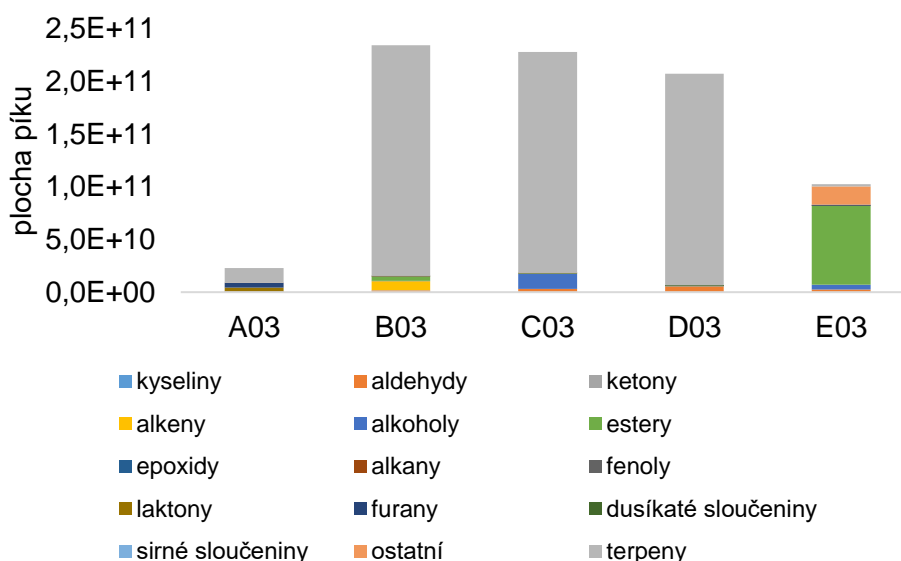
V grafu 16 je uvedeno porovnání z hlediska obsahu chemických skupin u vzorků zelené barvy. Jak lze vidět v tomto grafu, profil u jednotlivých vzorků je velmi odlišný. Největší množství sloučenin obsahoval vzorek výrobce C, u kterého byla více jak třetina tvořena sloučeninami zařazenými do skupiny ostatní. Z této třetiny tvořil více jak 65 % 4-methyl-2-(1-pentenyl)-1,3-dioxolan, který je dle literatury [68] právě nositelem aroma zelených jablek. Podobně tomu bylo i u vzorku B, kde tato sloučenina tvořila přes 30 % obsahu všech sloučenin.

Vzorek A a D byl tvořen z větší části estery (u A 75 a u D 87 %). Vzorek E byl tvořen z větší části terpeny (38 %) a dále estery a alkoholy.



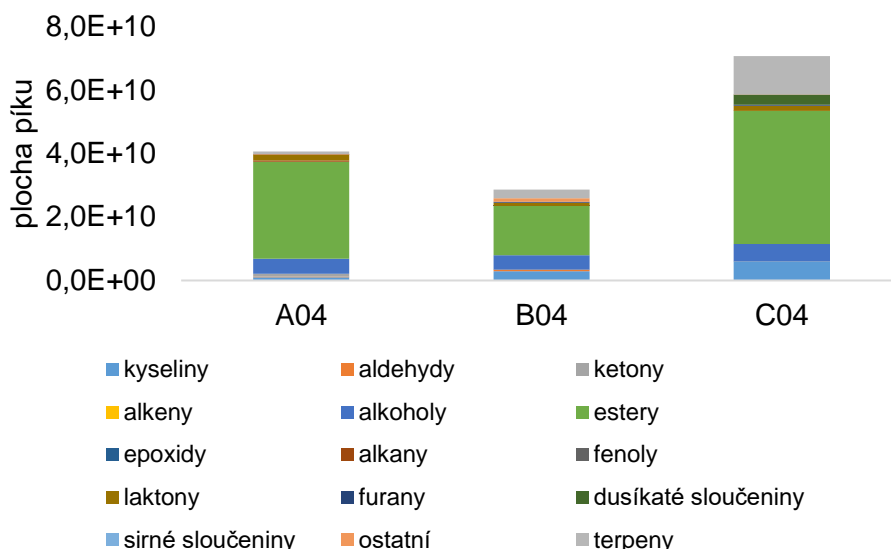
Graf 16: Srovnání množství identifikovaných sloučenin podle chemických skupin u vzorků zelené barvy; značení vzorků viz kapitola 3.3

Jak lze vidět v grafu 17, u žluté barvy, vzorky B, C a D obsahovaly největší množství sloučenin, z kterých tvořily více jak 90 % terpeny. Vzorek A, u kterého bylo sloučenin nejméně, byl tvořen terpeny z 60 %. U vzorku E byl celkový obsah sloučenin tvořen ze 70 % estery.



Graf 17: Srovnání množství identifikovaných sloučenin podle chemických skupin u vzorků žluté barvy; značení vzorků viz kapitola 3.3

U červené barvy, jak lze vidět v grafu 18, všechny vzorky byly tvořeny z více jak 50 % estery a společně bylo pro všechny také značné množství alkoholů. Vzorek výrobce C, který obsahoval největší množství sloučenin, byl tvořen ze 17 % terpeny.



Graf 18: Srovnání množství identifikovaných sloučenin podle chemických skupin u vzorků červené barvy; značení vzorků viz kapitola 3.3

4.4 Identifikace a kvantifikace alergenních vonných látek ve vzorcích

Vzhledem k tomu že problematika alergenů je v současné době velmi aktuální a zájem o vonné látky se stále zvyšuje, byla věnována zvláštní pozornost těmto látkám v analyzovaných vzorcích. Obecně je žádoucí se zabývat touto problematikou i v oblasti potravin; zvláště u takových, které konzumují malé děti.

Alergeny ve vzorcích byly identifikovány na základě srovnání hmotnostních spekter s dostupnou knihovnou spekter a kvantifikovány na základě vytvořených rovnic z kalibračních přímek. Jelikož množství těchto alergenních látek není v potravinách legislativně omezeno, pro hrubé přiblížení a posouzení možných nežádoucích účinků byla v této práci zvolena jako limitní koncentrace stanovená kosmetickou legislativou pro prostředky, které se neoplachují ($10 \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$).

Ve vzorcích bylo identifikováno celkově 19 alergenů. Jak lze vidět v následujících tabulkách 18 až 22, u některých vzorků byla tato koncentrace poměrně výrazně překročena. Indexy 1 a 2 u některých sloučenin značí izomery.

Ve vzorcích výrobce A bylo identifikováno celkově 19 alergenů, včetně 3 izomerů (viz tabulka 18). Stanovená limitní koncentrace byla překročena u všech vzorků u kumarinu, u zeleného vzorku dokonce až 11×. Kromě červeného vzorku byla limitní koncentrace překročena u všech také pro cinnamylalkohol, nejvíce opět u zeleného vzorku (více než 4×). Na obale výrobku jsou tyto vonné látky shrnuty označením “aromata“. Je zde ale také deklarován i přídatek ovocných šťáv z koncentráty, včetně jahodového, což mohlo být důvodem použití nižšího přídatku jahodového aroma (červený vzorek obsahuje nejméně alergenů).

Tabulka 18: Alergeny obsažené ve vzorcích výrobce A

Obsah alergenů ve vzorcích výrobce A [$\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$]				
Alergen	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
Benzylalkohol	$0,71 \pm 0,03$	$0,33 \pm 0,07$	$1,31 \pm 0,12$	$0,16 \pm 0,05$
Benzylbenzoát	$1,28 \pm 0,05$	–	–	–
Benzylcinnamát	$8,43 \pm 0,89$	$4,97 \pm 0,16$	$2,28 \pm 0,78$	$3,1 \pm 0,14$

Obsah alergenů ve vzorcích výrobce A [mg·kg ⁻¹]				
Alergen	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
Benzylsalicylát	3,67±0,00	4,2±0,34	nq	–
Cinnamal	nq	nq	nq	–
Cinnamylalkohol	22,79±0,45	47,93±0,99	13,24±1,56	–
Citral 1	–	–	nq	nq
Citral 2	nq	nq	nq	nq
Eugenol	1,96±1,01	2,35±0,08	–	–
Farnesol 1	0,33±0,00	–	–	0,3±0,08
Farnesol 2	0,51±0,23	0,4±0,17	–	0,6±0,24
Geraniol 1	0,03±0,01	0,01±0,01	nq	–
Geraniol 2	–	–	nq	–
Isoeugenol	nq	nq	6,02±0,23	–
Kumarin	68,44±5,34	113,24±3,47	100,05±8,34	19,28±2,46
Limonen	0,10±0,02	0,10±0,40	0,01±0,02	0,16±0,05
Linalool	0,33±0,12	0,02±0,14	0,05±0,06	–
α-Isomethyl ionon	3,78±0,45	nq	–	–
β-citronellol	0,03±0,01	–	–	–

nq – nebylo kvantifikováno

U výrobce B bylo identifikováno celkově 21 alergenů (včetně 3 izomerů). Zde byla překročena limitní koncentrace u obou izomerů citralu u oranžového a žlutého vzorku (4×). Dále byla překročena koncentrace u oranžového vzorku pro kumarin (3×) a linalool (2×). Výrazně překročen byl obsah limonenu u oranžového a žlutého vzorku, a sice, u oranžového 11× a u žlutého 8× (viz tabulka 19). Na obale výrobku jsou tyto vonné látky shrnuty pod názvem “aroma” a “přírodní aroma“, konkrétně pomerančové a citrónové. Z výsledků uvedených v tabulce 19 vyplývá, že koncentrace byly překročeny právě u vzorků s pomerančovou a citrónovou příchutí, tzn. že ač přídavek koncentrátů může mít za následek snížení přidávaného množství aromatu, nepochybně se i v nich vyskytují alergen vonné látky.

Tabulka 19: Alergeny obsažené ve vzorcích B

Obsah alergenů ve vzorcích výrobce B [mg·kg ⁻¹]				
Alergen	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
Benzylalkohol	0,10±0,05	0,73±0,12	–	–
Benzylbenzoát	0,30±0,08	3,97±1,01	–	–
Benzylcinnamát	nq	nq	nq	nq
Benzylsalicylát	–	nq	nq	nq
Cinnamal	0,01±0,00	nq	nq	nq
Cinnamylalkohol	nq	–	–	–
Citral 1	12,42±0,78	0,09±0,03	39,08±2,10	0,03±0,01
Citral 2	18,65±1,15	0,17±0,02	45,23±2,46	–
Citronellol	1,45±0,56	–	0,5±0,14	–
Eugenol	2,08±0,67	1,28±0,14	2,4±1,64	1,64±0,79
Farnesol 1	–	–	–	0,03±0,02
Farnesol 2	0,03±0,06	nq	–	nq
Geraniol 1	1,01±0,04	nq	1,02±0,04	–
Geraniol 2	0,72±0,08	–	0,72±0,12	–
Hexylcinnamal	–	3,47±0,67	–	–
Isoeugenol	nq	–	–	–

Obsah alergenů ve vzorcích výrobce B [mg·kg ⁻¹]				
Alergen	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
Kumarin	29,61±1,67	4,53±0,98	4,05±0,59	6,42±0,83
Lilial	–	nq	–	–
Limonen	112,34±2,35	3,21±0,67	79,15±1,67	4,04±1,37
Linalool	18,88±2,10	0,07±0,03	–	0,01±0,01
Lyrál	–	4,86±0,09	–	–

nq – nebylo kvantifikováno

Vzorky výrobce C obsahovaly celkově 21 různých alergenů, včetně 3 izomerů (viz tabulka 20). Výrazně překročena byla limitní koncentrace u červeného vzorku pro amylcinnamal (14×). Koncentrace pro benzylalkohol byla překročena u vzorku oranžového a žlutého, a to více než 4×. Dále byl překročen limit u citralu u žlutého vzorku. Výrazně překročen byl překročen také obsah limonenu u oranžového (10×) a žlutého (8×) vzorku. Na obale tohoto výrobku byly vonné látky shrnuty pod názvem “aromata”. Navíc byly součástí složení také ovocné šťávy z koncentráty (pomerančová, citronová, jablečná i jahodová).

Tabulka 20: Alergeny obsažené ve vzorcích C

Obsah alergenů ve vzorcích výrobce C [mg·kg ⁻¹]				
Alergen	Oranžový	Zelený	Žlutý	Červený
Amylcinnamal	–	–	–	144,99±2,56
Benzylalkohol	45,72±1,23	1,54±0,56	46,37±2,34	–
Benzylbenzoát	0,17±0,04	–	–	0,26±0,03
Benzylcinnamát	–	nq	nq	nq
Benzylsalicylát	nq	nq	3,41±0,00	14,74±0,16
Cinnamal	nq	nq	nq	nq
Cinnamylalkohol	–	–	nq	–
Citral 1	3,23±0,62	nq	21,75±1,21	–
Citral 2	6,07±0,88	0,06±0,07	39,47±0,97	–
Citronellol	0,88±0,12	0,03±0,01	0,34±0,11	0,05±0,01
Eugenol	–	–	–	0,39±0,11
Farnesol 1	0,06±0,01	0,04±0,01	–	–
Farnesol 2	0,05±0,02	nq	–	–
Geraniol 1	0,71±0,03	0,01±0,00	1,66±0,03	0,01±0,01
Geraniol 2	0,29±0,01	–	0,74±0,12	0,06±0,11
Hexylcinnamal	4,27±0,11	nq	nq	9,40±0,76
Isoeugenol	–	–	nq	–
Isomethylionon	–	–	–	65,42±2,32
Kumarin	2,70±0,66	3,38±0,71	21,30±1,24	3,85±0,78
Limonen	104,37±4,23	1,65±0,06	88,22±2,12	0,16±0,03
Linalool	15,70±1,21	0,11±0,02	1,60±0,01	14,04±0,49

nq – nebylo kvantifikováno

U vzorků výrobce D bylo identifikováno celkově 17 alergenů, včetně 2 izomerů (viz tabulka 21). Limitní koncentrace byla překročena u žlutého vzorku u citralu (5×) a limonenu (9×). Oranžový vzorek měl opět výrazně překročen obsah limonenu (11×) a mírně překročena u něho byla koncentrace u linaloolu (1,5×). Na obale výrobku byly vonné látky shrnuty pod názvem “aromata”.

Tabulka 21: Alergeny obsažené ve vzorcích D

Obsah alergenů ve vzorcích výrobce D [mg·kg ⁻¹]			
Alergen	Oranžový	Zelený	Žlutý
Benzylalkohol	0,28±0,07	0,69±0,06	0,09±0,02
Benzylcinnamát	nq	nq	nq
Benzylsalicylát	–	–	nq
Cinnamal	–	nq	–
Amylcinnamal	–	nq	–
Hydroxycitronellal	nq	–	–
Citral 1	1,93±0,05	0,03±0,01	43,99±1,23
Citral 2	4,18±0,99	0,05±0,01	55,98±0,98
Citronellol	0,71±0,12	–	–
Farnesol	–	nq	–
Geraniol 1	0,56±0,11	–	2,51±0,09
Geraniol 2	0,24±0,06	–	2,86±0,07
Hexylcinnamal	nq	nq	nq
Kumarin	3,02±1,00	2,09±0,96	–
Limonen	111,92±2,54	1,14±0,67	96,2±1,98
Linalool	16,23±0,89	nq	7,12±0,67
Lylal	nq	–	–

nq – nebylo kvantifikováno

Vzorky výrobce E obsahovaly celkově 18 alergenů, včetně 2 izomerů (viz tabulka 22). Největší množství překročených limitů obsahoval vzorek oranžové barvy, u kterého byla překročena koncentrace pro limonen (6×), linalool (3×) a citral (1×). Vzorek žluté barvy měl překročený limit pro benzylcinnamát (5×), benzylsalicylát (5×) a cinnamylalkohol (2×). Na obale výrobku jsou vonné látky shrnuty pod názvem “přírodní aroma“. Kromě toho je zde deklarován přídatek koncentráту ovocné šťávy (jablko, pomeranč, citrón), což opět mohlo vést k použití menšího množství aromat.

Tabulka 22: Alergeny obsažené ve vzorcích E

Obsah alergenů ve vzorcích výrobce E [mg·kg ⁻¹]			
Alergen	Oranžový	Zelený	Žlutý
Amylcinnamal	–	–	0,48±0,05
Benzylalkohol	0,10±0,02	0,30±0,08	0,86±0,06
Benzylbenzoát	–	–	0,53±0,20
Benzylcinnamát	nq	2,46±0,21	47,10±1,08
Benzylsalicylát	nq	nq	51,51±1,45
Cinnamal	–	–	nq
Cinnamylalkohol	–	–	21,45±0,97
Citral 1	8,24±0,78	0,07±0,03	nq
Citral 2	13,15±0,89	0,18±0,04	nq
Citronellol	2,50±0,87	–	–
Eugenol	–	–	0,85±0,03
Geraniol 1	2,22±0,67	0,01±0,01	–
Geraniol 2	0,96±0,03	0,01±0,00	–
Hexylcinnamal	nq	nq	3,72±0,07
Isoeugenol	–	–	nq

Obsah alergenů ve vzorcích výrobce E [mg·kg ⁻¹]			
Alergen	Oranžový	Zelený	Žlutý
Kumarin	1,95±0,06	nq	1,37±0,05
Limonen	59,92±1,43	9,82±0,98	0,27±0,01
Linalool	28,94±1,03	1,29±0,41	nq

nq – nebylo kvantifikováno

Z naměřených dat vyplývá, že nejmenší množství alergenů se vyskytovalo ve vzorcích výrobce D (5) a E (6). Naopak největší počet překročených limitů bylo u vzorků výrobce C (19). Výrobky C obsahovaly kromě aromat a ovocných extraktů také větší množství extraktů rostlinných, plnicích funkcí barviv, ty ale pravděpodobně obsahují také alergenní vonné látky.

4.5 Senzorické hodnocení vzorků cukrovinek

Analyzované vzorky byly zároveň senzoricky hodnoceny. Hlavním cílem senzorického hodnocení bylo popsat senzorickou kvalitu vzorků se zaměřením především na chuť/vůni a posoudit rozdíly mezi jednotlivými výrobci. Byly tedy porovnávány jednotlivé barvy různých výrobců mezi sebou.

U vzorků byla hodnocena intenzita a příjemnost barvy, vůně a chuti (flavouru). Vzhledem k charakteru vzorků (kandyty mají tvrdou, a lze předpokládat, že všechny vzorky stejnou, konzistenci), tato nebyla zahrnuta do hodnocení.

Pomocí profilového testu byla hodnocena intenzita sladkosti a kyselosti vzorků, zároveň měli hodnotitelé možnost použít vlastní deskriptor v kolonce „jiná chuť“, zde nás zajímalo, zda budou schopni identifikovat danou ovocnou příchut', příp. zde mohli pospat eventuální pachut', pokud ve vzorcích detekovali. Na závěr byla hodnocena celková senzorická kvalita/přijatelnost vzorků. Pro snadnější zpracování výsledků byla ve všech případech pro hodnocení použita grafická stupnice (10 cm), veškeré výsledky jsou prezentovány jako průměr hodnocení všech hodnotitelů (n=15), chybové úsečky vyjadřují směrodatnou odchylku měření. Z grafů 19–30 je patrná směrodatná odchylka poměrně velká, to je u senzorické analýzy, a zvláště u méně zkušených hodnotitelů, očekávatelné.

4.5.1 Hodnocení barvy

Barva hraje při hodnocení cukrovinek významnou roli, musí být v souladu s očekáváním konzumenta, tzn. že spotřebitel od vzorku červené barvy očekává, že bude mít chuť jahodovou, vzorek oranžový chuť pomerančovou apod.

Jednotlivé vzorky se celkovým vzhledem od sebe lišily. Měly rozdílné tvary, intenzitu i odstín barvy. Většinou bývá lépe hodnocena barva sytější, která by ale měla zároveň působit přirozeně. Příliš intenzivní a jasné barvy vzbuzují dojem přídavku syntetických barviv.

V následujících podkapitolách jsou uvedeny výsledky hodnocení jednotlivých barev. Slovní hodnocení barev je součástí příloh 20 až 23. Grafy 19 až 22 znázorňují srovnání intenzity/přijemnosti barvy od jednotlivých výrobců.

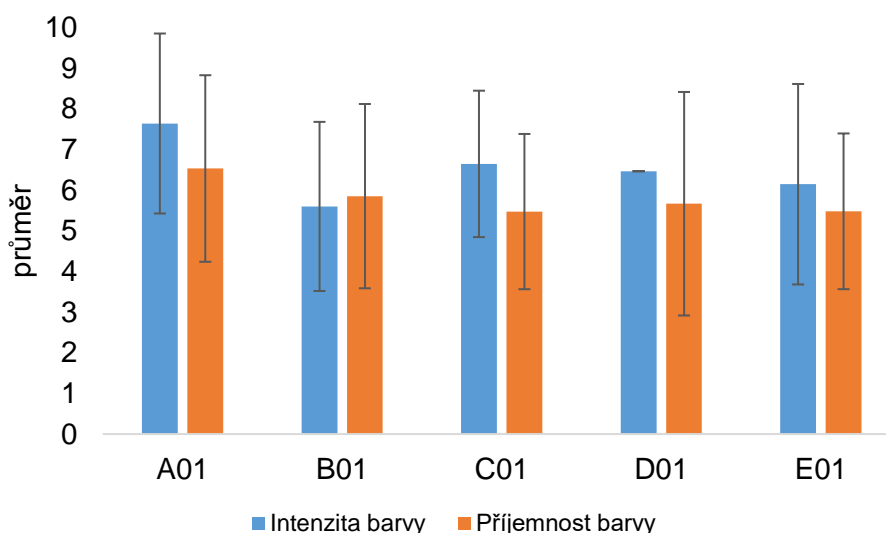
4.5.1.1 Vzorky oranžové barvy

Jak lze vidět v grafu 19, nejlépe hodnocený, ať z hlediska intenzity, tak z hlediska příjemnosti byl vzorek výrobce A. Jeho barva byla popisována jako průhledná intenzivní oranžová. Naopak nejhůře hodnocené z obou hledisek byly vzorky výrobce B a E.



Obrázek 12: Vzorky oranžové barvy, zleva výrobce A, B, C, D a E

Vzorek B byl popisován jako výrazně oranžový matný se znatelným šrafováním, vzorek E jako žlutý až méně intenzivní žlutooranžový. Slovní hodnocení jednotlivých vzorků oranžové barvy je uvedeno v příloze 20; jejich vzhled lze vidět na obrázku 12.



Graf 19: Srovnání intenzity a příjemnosti barvy vzorků oranžové barvy

Pokud porovnáme výsledky se složením (viz kapitola 3.2), vzorek A má znatelně bohatší složení, kde nositelem oranžové barvy jsou karoteny, ale pravděpodobně také přirozené látky z koncentráty (meruňka, mrkev). U vzorku B je ve složení uvedeno jako oranžové barvivo kurkumin. U vzorku D je nositelem oranžové barvy koncentrát z mrkve a vzhledem ke slovnímu hodnocení, kde se často objevoval popis oranžový až červený, zde mohlo být zbarvení těchto vzorků způsobeno také přítomným extraktem z červené řepy.

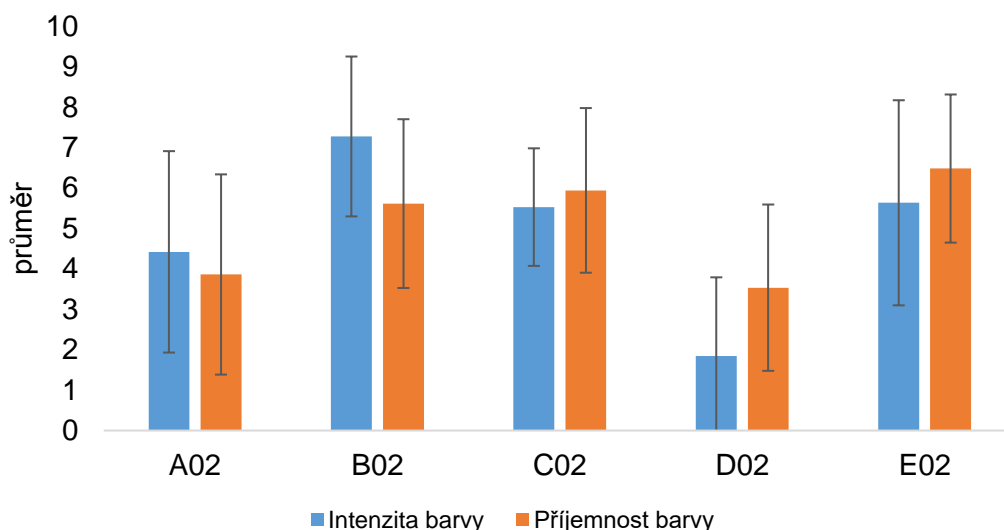
4.5.1.2 Vzorky zelené barvy

Slovní popis vzorků zelené barvy je uveden v příloze 21. Z grafu 20 lze vidět, že nejlépe hodnocený z hlediska příjemnosti byl vzorek výrobce E. Naopak nejméně intenzivní a nejméně příjemnou barvu měl vzorek výrobce D. Pro názornost jsou jednotlivé vzorky zobrazeny na obrázku 13.



Obrázek 13: Vzorky zelené barvy, zleva výrobce A, B, C, D a E

Nositelům zelené barvy u vzorku E jsou kromě koncentrátů a rostlinných extraktů také navíc měďnaté komplexy chlorofylů a chlorofylinů, které se vyznačují menší citlivostí na světlo a vyšší intenzitou barvy než chlorofyly. U vzorku výrobce D je zelená barva docílena rostlinným extraktem z řasy spiruliny. Oba tyto vzorky byly ve slovním popisu charakterizovány jako světle zelené, méně výrazné a s nádechem žluté barvy. Vzorek výrobce A, který dopadl nejlépe u oranžové barvy, byl u zelené barvy naopak hodnocen dokonce jako nepříjemný s tmavším odstínem žlutozelené barvy až dohněda.



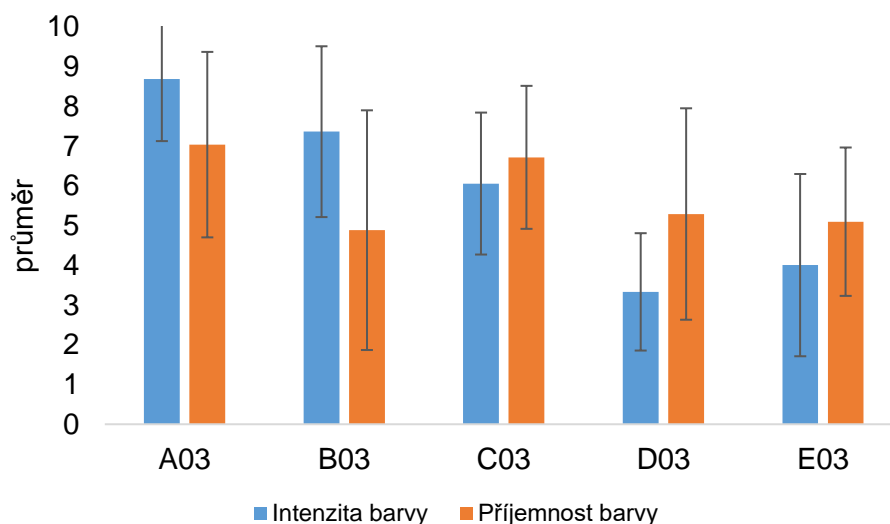
Graf 20.: Srovnání intenzity a příjemnosti barvy vzorků zelené barvy

4.5.1.3 Vzorky žluté barvy

Slovní popis jednotlivých vzorků žluté barvy je uveden v příloze 22. Z grafu 21 lze vyčíst, že vzorek výrobce A byl hodnocen opět nejlépe. Vyšší hodnocení příjemnosti barvy měl také vzorek výrobce C. Naopak jako nejméně příjemný byl hodnocen vzorek B. Při srovnání těchto výsledků se složením měl tento výrobce mnohem jednodušší složení bez přírodních či rostlinných koncentrátů. Jednotlivé vzorky jsou zobrazeny na obrázku 14



Obrázek 14: Vzorky žluté barvy, zleva výrobce A, B, C, D a E



Graf 21: Srovnání intenzity a příjemnosti barvy vzorků žluté barvy

Nositelem žluté barvy u vzorku A je světlice barvířská, u ostatních vzorků nelze původce této barvy ze složení jednoznačně určit.

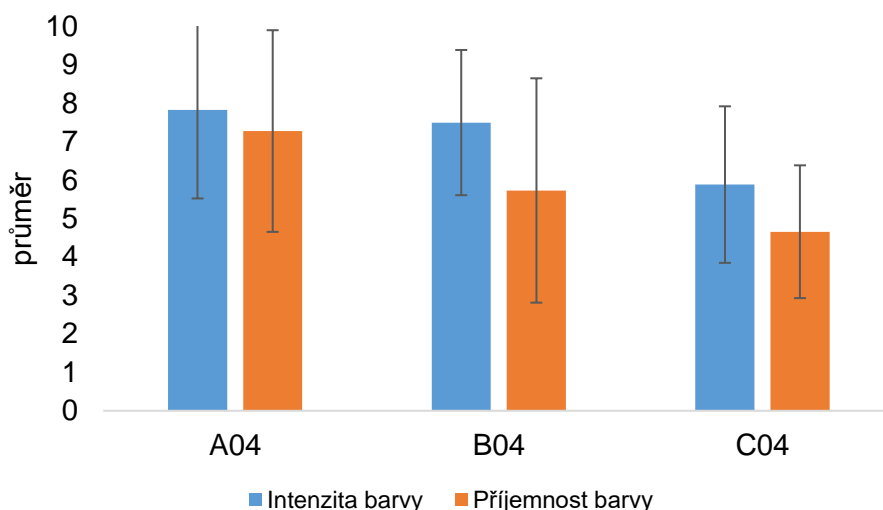
4.5.1.4 Vzorky červené barvy

Slovní popis vzorků červené barvy je uveden v příloze 23. V grafu 22 je zobrazeno porovnání příjemnosti a intenzity jednotlivých vzorků. Na obrázku 15 jsou jednotlivé vzorky zobrazeny.



Obrázek 15: Vzorky červené barvy, zleva vzorce A, B, a C

Z grafu lze vyčíst, že nejlépe hodnocený vzorek byl A a nejhůře C. Nositelem červené barvy u výrobku A byla jahodová šťáva a ibišek. Vzorek C obsahoval také koncentrovanou jahodovou šťávu a navíc také šťávu z černé mrkve a paprikový extrakt. Vzorek A byl popisován jako tmavě červený až vínový, lesklý, kdežto vzorek C byl charakterizován jako světle červeno-růžový.



Graf 22: Srovnání intenzity a příjemnosti barvy vzorků červené barvy

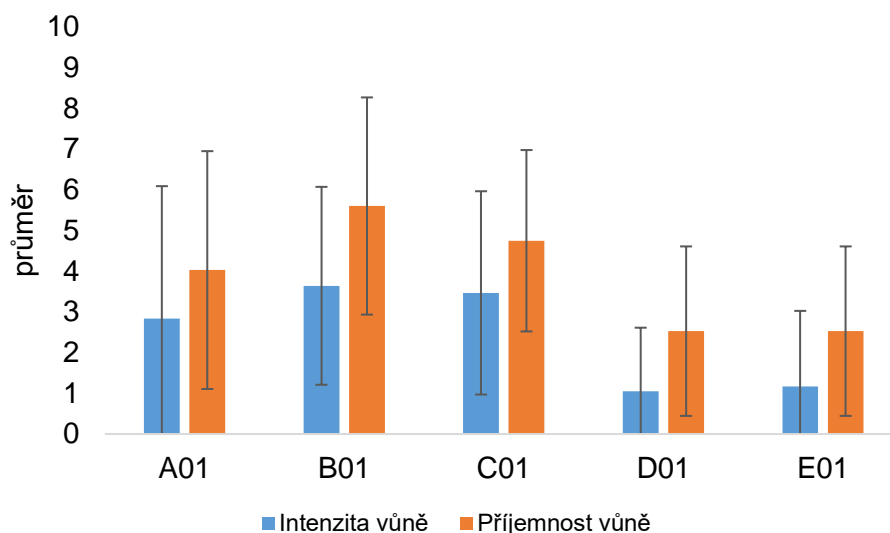
4.5.2 Hodnocení vůně

Jak již bylo uvedeno, byly hodnoceny 4 vybrané příchutě: pomeranč (oranžový), jablko (zelený), citron (žlutý) a jahoda (červený), vybrané příchutě zastupovaly nejvýznamnější dobře rozpoznatelné ovocné chutě. Tak jako barva, také i vůně indikuje příchut' dané cukrovinky, tzn. že pokud se jedná o oranžovou cukrovinku, očekává se, že vůně bude pomerančová. Úkolem hodnotitelů bylo vůni nejprve rozeznat a popsat, následně určovali její intenzitu a příjemnost. Slovní popis jednotlivých vzorků je součástí příloh 24 až 27. U některých vzorků nebyla pravděpodobně vůně rozeznána, proto jsou pole označená znakem „-“.

Pro přehlednost jsou výsledky opět uspořádány v jednotlivých podkapitolách podle barev. V grafech 23 až 26 je zobrazeno porovnání intenzity a příjemnosti vůně jednotlivých vzorků.

4.5.2.1 Vzorky oranžové barvy

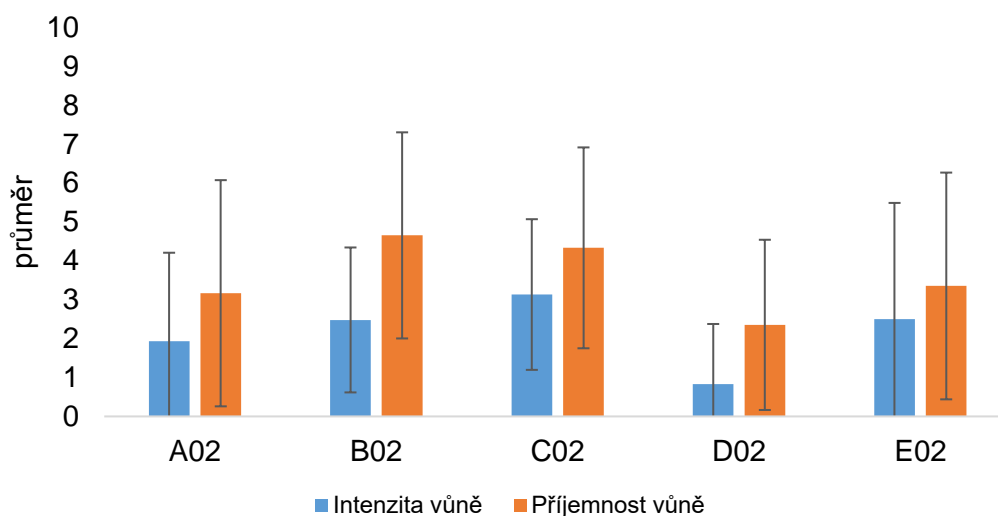
Jak lze vidět v grafu 23, nejlépe hodnocena vůně byla u vzorku B, u kterého bylo použito i aroma přírodní (pomerančové). Dále byla kladně hodnocena vůně i u vzorků A a C, což bylo pravděpodobně z důvodu použití koncentrovaných ovocných šťáv. U vzorků D a E byly vůně velmi málo intenzivní, což se projevilo i v celkovém hodnocení příjemnosti vůně. Podrobnější popis vůně jednotlivých vzorků je uveden v příloze 24.



Graf 23: Srovnání intenzity a příjemnosti vůně vzorků oranžové barvy

4.5.2.2 Vzorky zelené barvy

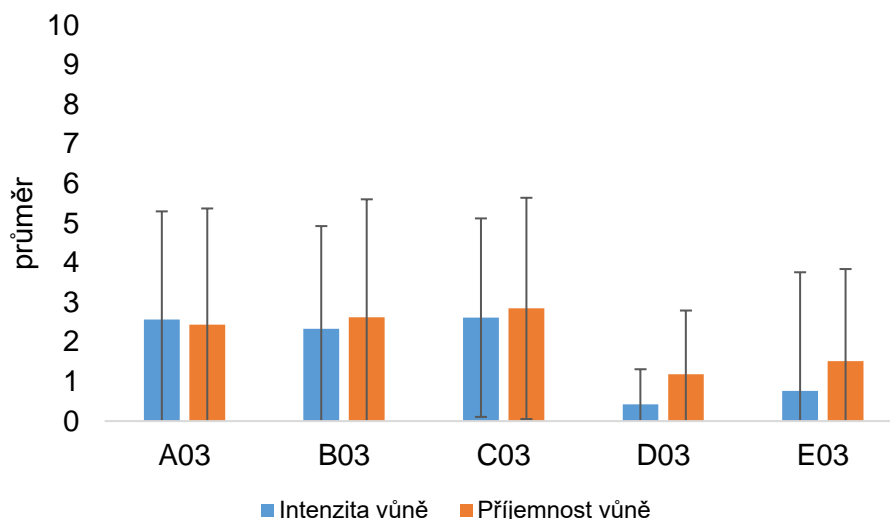
Jak vyplývá z grafu 24, jako vzorky s nejlépe hodnocenou vůní byly vzorky B a C. U obou vzorků byly vonné látky shrnuty pod pojmem aroma. Nositeli vůně u vzorku C mohly být i látky obsažené v koncentrátu ovocné šťávy. U vzorku D byla intenzita vůně opět velmi slabá. Podrobnější popis slovního hodnocení vzorků je uveden v příloze 25.



Graf 24: Srovnání intenzity a příjemnosti vzorků zelené barvy

4.5.2.3 Vzorky žluté barvy

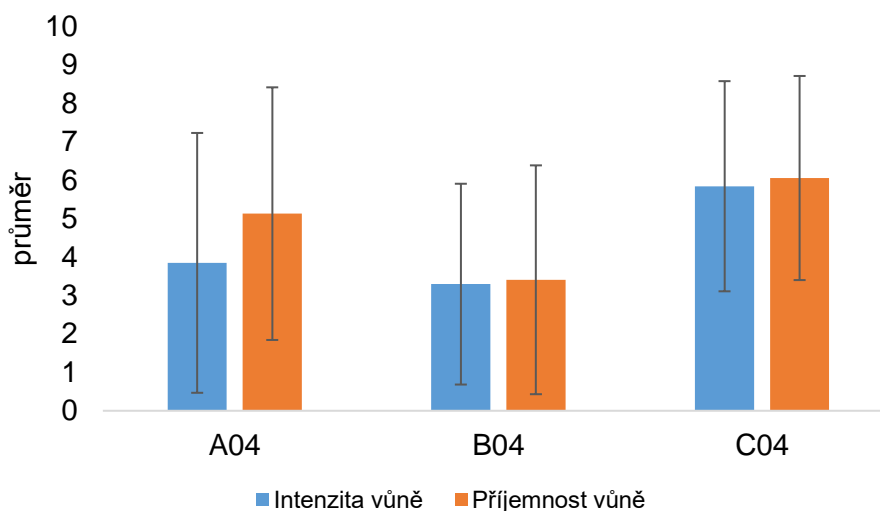
Jak lze vyčíst z grafu 25, jako vzorky s nejvyšší intenzitou a příjemností vůně byly hodnoceny vzorky B, C a také A. Vzorky výrobce D a E měly intenzitu velmi nízkou, což se projevilo v hodnocení příjemnosti vůně těchto vzorků. Podrobnější popis vůní jednotlivých vzorků je uveden v příloze 26.



Graf 25: Srovnání intenzity a příjemnosti vůně vzorků žluté barvy

4.5.2.4 Vzorky červené barvy

Jak lze vidět v grafu 26 u vzorků červené barvy byl nejlépe hodnocen vzorek C, který měl také zároveň nejintenzivnější vůni. Dobře hodnocen byl i vzorek A. U obou byly ve složení uvedeny koncentrované ovocné šťávy (jahodové) a aroma. Vzorek B měl oproti těmto dvěma složení značně jednodušší. Podrobnější popis hodnocení vzorků této barvy je uveden v příloze 27.)



Graf 26: Srovnání intenzity a příjemnosti vůně vzorků červené barvy

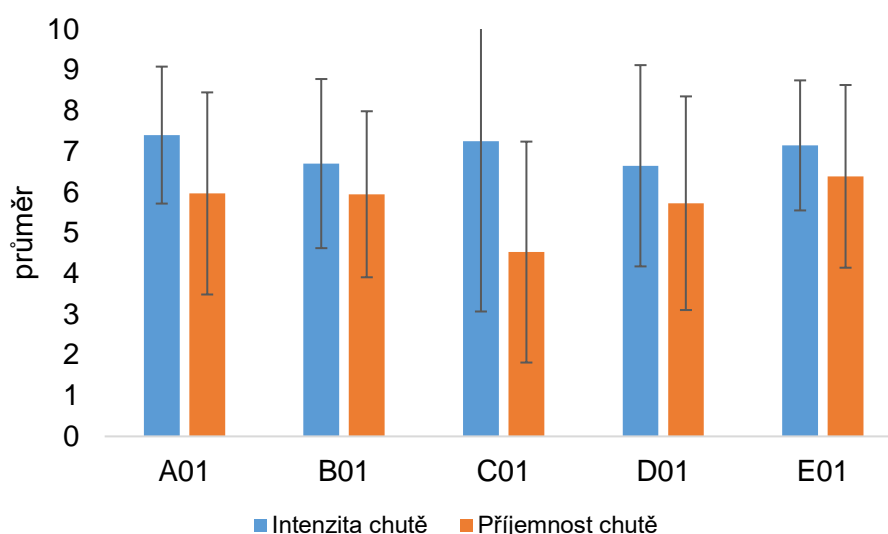
4.5.3 Hodnocení chuti

Chuť (flavour) zahrnuje komplexní pocit v ústech při konzumaci. I tato vlastnost byla, podobně jako vůně, hodnocena popisem vnímané chuti a označením intenzity a příjemnosti.

Pro přehlednost jsou výsledky opět uspořádány v jednotlivých podkapitolách dle barev. V přílohách 28 až 29 jsou uvedeny podrobnější popisy chutí jednotlivých vzorků.

4.5.3.1 Vzorky oranžové barvy

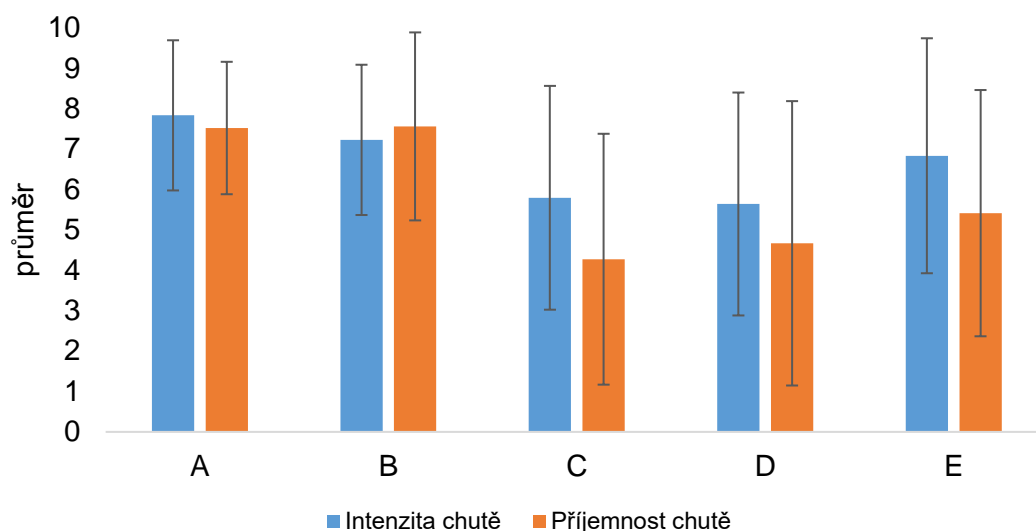
Jak lze vidět v grafu 27, nejlepšího hodnocení z hlediska intenzity i příjemnosti dosáhl vzorek výrobce E a dále vzorky A a B. Vzorek E obsahoval ze všech vzorků největší množství koncentrované ovocné šťávy (0,9 %), což mohlo být důvodem tak dobrého hodnocení. Zajímavostí je, že vzorek B, který byl také dobře hodnocen, má oproti ostatním vzorkům velmi strohé složení, bez jakýchkoliv koncentrátů a jeho chuť byla docílena především cukernými látkami a kyselinou citronovou. Na druhou stranu je zde ale uvedeno i blíže nespecifikované „aroma“. Podrobnější popisy jednotlivých chutí vzorků jsou zobrazeny v příloze 28.



Graf 27: Srovnání příjemnosti a intenzity chutě oranžových vzorků

4.5.3.2 Vzorky zelené barvy

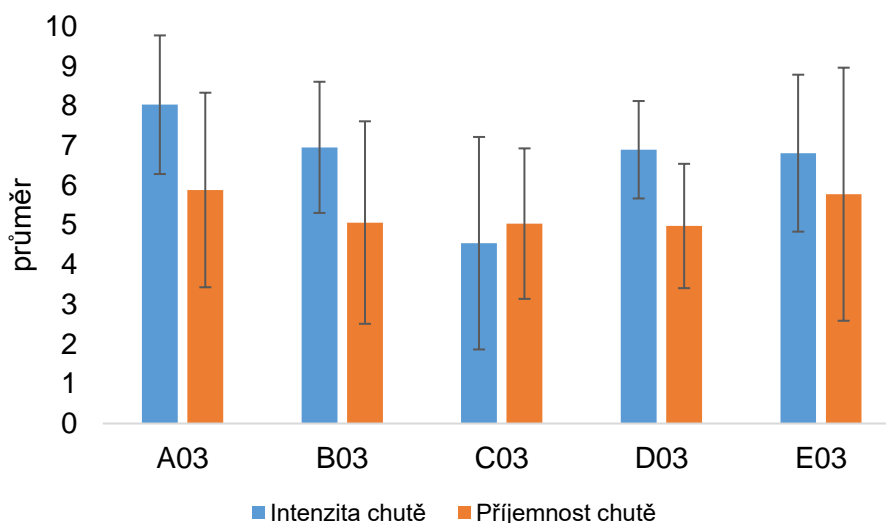
U vzorků zelené barvy byly hodnoceny jako nejlepší vzorky výrobce A a B. (viz graf 28). Srovnáním složení těchto vzorků má vzorek B opět menší množství surovin, z nichž nejsou žádné přírodní koncentráty. Vzorek C, který byl hodnocen nejhůře, byl popisován jako příliš sladký s umělou příchutí. Popis chutí jednotlivých vzorků je součástí přílohy 29.



Graf 28: Srovnání příjemnosti a intenzity chutě zelených vzorků

4.5.3.3 Vzorky žluté barvy

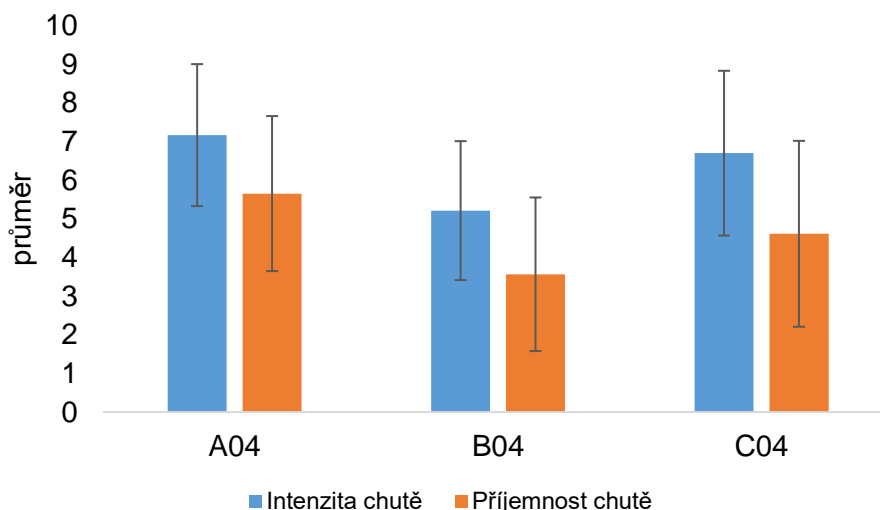
Jak vyplývá z grafu 29, u vzorků žluté barvy byly nejlépe hodnoceny vzorky A a E, které v porovnání se složením obsahovaly největší množství koncentrovaných ovocných šťáv. Vzorek výrobce D, který dopadl z hlediska příjemnosti nejhůře, byl hodnocen jako nepříjemný s příliš silnou až agresivní kyselou příchutí. Popis chuti jednotlivých vzorků je uveden v příloze 30.



Graf 29: Srovnání příjemnosti a intenzity chutě žlutých vzorků

4.5.3.4 Vzorky červené barvy

Jak vyplývá z grafu 30, nejlépe hodnocen byl vzorek výrobce A. Naopak nejhůře hodnocený byl vzorek B, u kterého byla během hodnocení často zmíněna umělá, nepříjemná pachuť, což mohlo být pravděpodobně způsobeno přidaným aroma u této barvy, jelikož ostatní vzorky/barvy tohoto výrobce byly hodnoceny často i jako nejlepší. Podrobnější popis hodnocení jednotlivých vzorků je uveden v příloze 31.



Graf 30: Srovnání příjemnosti a intenzity chutě červených vzorků

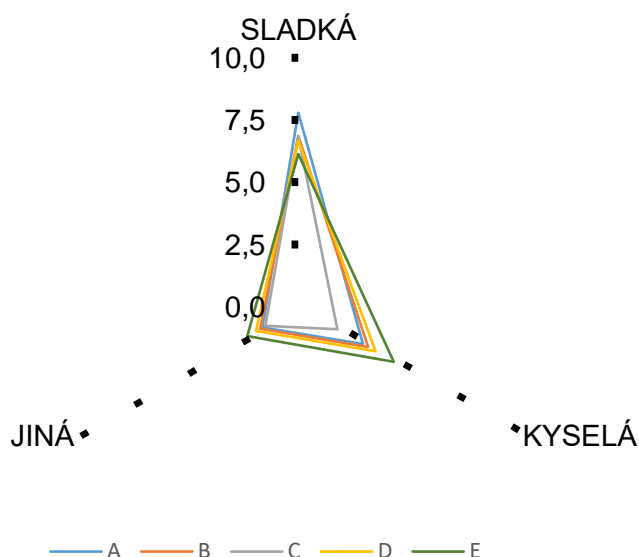
4.5.4 Profilový test

Hodnocení chuti bylo doplněno jednoduchým profilovým testem. Celkový flavour ovocných produktů je dán jednak správně vyváženým poměrem sladké vs. kyselé chuti, flavour cukrovinek je však nejvíce ovlivněn základní příchutí, tzn. pomerančovou, jablečnou, citronovou a jahodovou. Posoudit celkovou přijatelnost chuti je však diskutabilní, protože každý spotřebitel preferuje jinou chuť, někdo má rád kyselejší, někdo sladší. Proto měli hodnotitelé posoudit tyto tři základní deskriptory chuti, tj. sladká, kyselá a „jiná“, a jejich příspěvek k celkovému flavouru jednotlivých vzorků dropsů. V kategorii jiná měli hodnotitelé uvést jakýkoliv deskriptor, který jim připadá u daného vzorků výrazný, tedy hlavně identifikovaná ovocná chuť, ale i případná přítomnost pachutí. Pro přehlednost jsou výsledky uvedeny opět v podkapitolách dle barev.

V grafech 31 až 34 je znázorněna intenzita sledovaných deskriptorů u jednotlivých vzorků. Použitá stupnice byla vždy od neznatelné až po velmi silnou chuť a výsledky byly prezentovány formou průměru.

4.5.4.1 Vzorky oranžové barvy

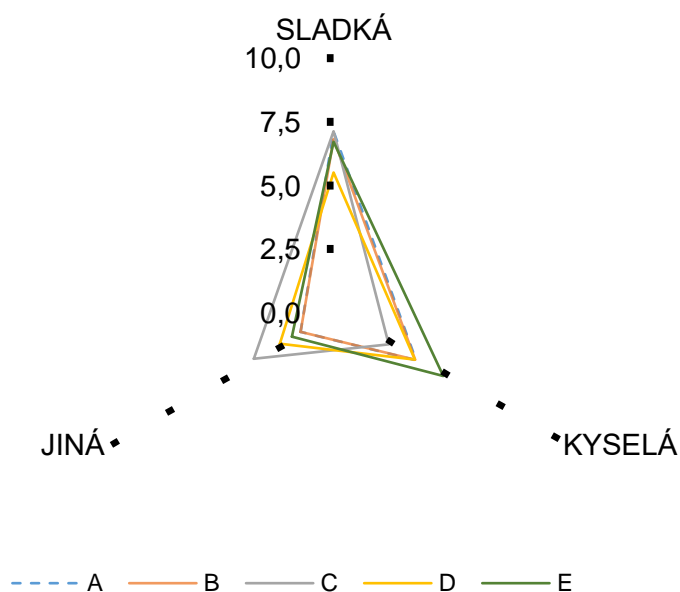
Jak vyplývá z grafu 31, jako nejkyselejší byl hodnocen vzorek E, tento vzorek měl zároveň nejnižší intenzitu sladké chuti. U ostatních vzorků naopak převládala chuť sladká. U vzorku E byla navíc také vyhodnocena chuť jiná, která byla popisována jako ovocná a umělá.



Graf 31: Profilový test vybraných deskriptorů chuti vzorků oranžové barvy

4.5.4.2 Vzorky zelené barvy

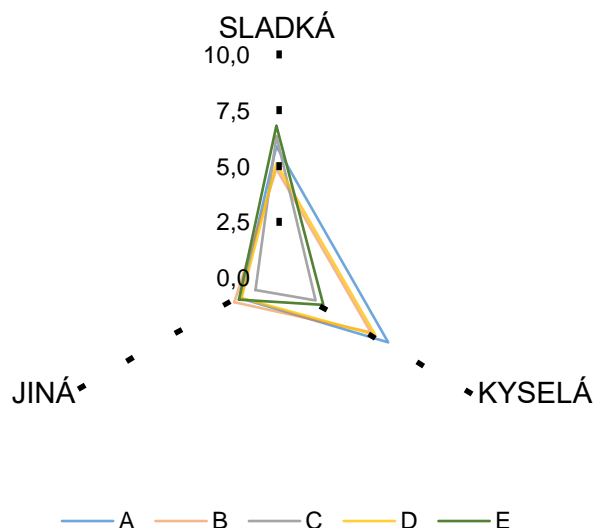
Jak je zobrazeno v grafu 32, jako nejméně kyselý a nejvíce sladký byl hodnocen vzorek C. Vzorek E byl hodnocen opět jako nejvíce kyselý. Jiná chuť byla identifikována u vzorku C a D, kdy u vzorku C byla popisována jako umělá, hořká a bylinková a u vzorku D jako pachut' umělá a nepříjemná ovocná (shnilá jablka). Profil ostatních vzorků byl velmi podobný, vyvážená sladká vs. kyselá chuť.



Graf 32: Profilový test vybraných deskriptorů zelené barvy

4.5.4.3 Vzorky žluté barvy

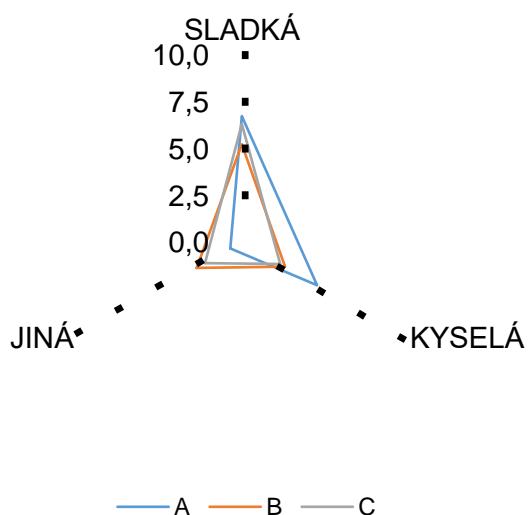
Oproti předchozím barvám, v grafu 33 lze vidět značné rozdíly v hodnocení jednotlivých vzorků. Jako nejvíce sladký byl hodnocen vzorek E. Naopak jako nejvíce kyselý byl hodnocen vzorek A. U vzorků B a E byly navíc identifikovány jiné příchutě, a sice v případě vzorku B to byla příchut' nahořklá, umělá; u vzorku E to byla také umělá pachut', nepřipomínající citron.



Graf 33: Profilový test vybraných deskriptorů žluté barvy

4.5.4.4 Vzorky červené barvy

Z grafu 34, lze vyčíst, že nejvíce sladký a zároveň kyselý byl vzorek výrobce A. Vzorky B a C byly nejenom méně sladké a kyselé, ale byla u nich navíc identifikována jiná chuť, v obou případech se jednalo o chuť umělou.

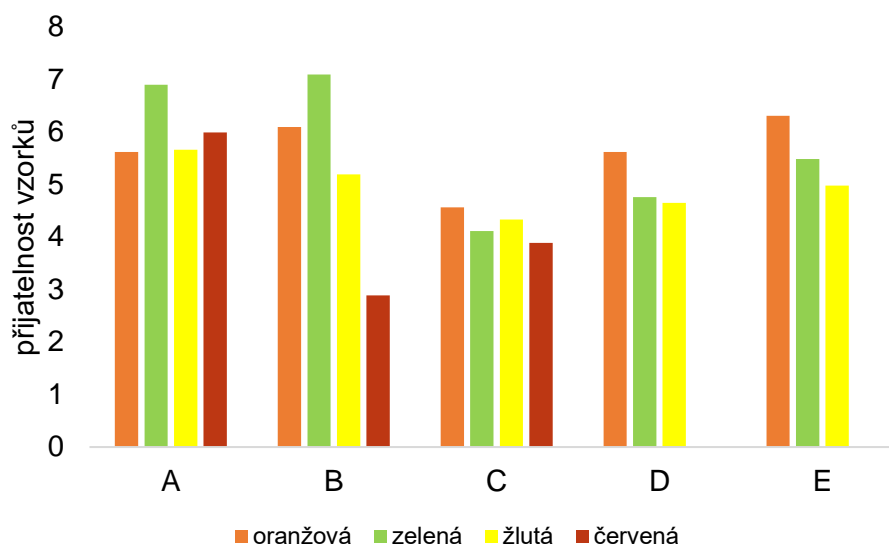


Graf 34: Profilový test vybraných deskriptorů červené barvy

4.5.5 Celková přijatelnost vzorků

Na závěr měli hodnotitelé zhodnotit celkovou přijatelnost jednotlivých vzorků. K tomu měli brát v úvahu veškeré výše zmíněné senzorycké vlastnosti. Dále byla také možnost slovního zdůvodnění jejich rozhodnutí (viz přílohy 32 až 35).

Srovnání celkové přijatelnosti jednotlivých vzorků je zobrazeno v grafu 35; přičemž výsledky jsou prezentovány pomocí průměru.



Graf 35: Srovnání celkové přijatelnosti všech vzorků A až E; použitá stupnice od nepřijatelný (0) až vynikající (8)

Označení nejlepšího výrobce je poměrně obtížné, protože hodnocení jednotlivých dílčích vlastností je různé. Z grafu 35 lze vidět, že největší zastoupení vzorků s vyšší celkovou přijatelností má výrobce A a potom i B, proto by bylo možné je označit jako nejlepší. Naopak nejnižší hodnocení bylo u vzorků výrobce C.

U výrobce A byly vzorky chváleny pro svůj vzhled a příjemnou chuť. Pro některé hodnotitele ale byly tyto vzorky až příliš sladké.

U výrobce B byla u většiny vzorků kritizována umělá pachut' a také jeho drobová konzistence. Kladně byla většinou u těchto vzorků hodnocena barva a celková příjemnost chuti.

U vzorků výrobce C byla kladně hodnocena jejich barva a vůně. Chuť byla většinou hodnocena jako velmi sladká a s umělou pachutí. Negativně zde byl hodnocen i tvar a struktura vzorků kvůli ostřejšímu povrchu.

Vzorky výrobce D byly kladně hodnoceny pro svou intenzivní ovocnou chuť. Aroma těchto vzorků bylo často hodnoceno jako velmi slabé. Barva a tvar těchto vzorků byly z větší části hodnoceny jako příjemné.

Vzorky výrobce E byly kladně hodnoceny pro svůj vzhled a příjemnou chuť. Některým hodnotitelům vzorky tohoto výrobce přišly příliš sladké a se slabým aroma.

Podrobnější popis celkové přijatelnosti jednotlivých vzorků je uveden v přílohách 32 až 35.

5. ZÁVĚR

V dnešní době je řada potravin aromatizována, jedná se zvláště o cukrovinky, limonády, čaje, alkoholické nápoje apod. I přesto, že vonné látky vykazují na lidský organismus řadu blahodárných účinků (léčiva, farmaceutické výrobky), některé z nich mohou být pro citlivé jedince alergenní. Dosud bylo identifikováno 26 potenciálně alergenních vonných látek, jejichž obsah je již legislativně limitován v kosmetickém průmyslu (Nařízení č. 1223/2009/ES), v průmyslu potravinářském této problematice není zatím věnována dostatečná pozornost.

Tato diplomová práce se zaměřuje konkrétně na studium nečokoládových cukrovinek. Hlavním záměrem bylo provést monitoring cukrovinek dostupných na Českém trhu, jako modelové vzorky byly vybrány cukrovinky typu „dropsy“. Dropsy jsou dle platné legislativy (vyhláška č. 43/2005 Sb.) definovány jako „cukrovinky neplněné, z kandytové hmoty, složené převážně z cukrů a glukózového sirupu, různě tvarované, různé barvy a chuti a tvrdé konzistence“. Docílení žádoucích barev, chutí a vůní těchto produktů se neobejde bez použití různých barvicích a aromatizujících přísad, pro tuto práci byly vybrány čtyři barvy (příchutě), které se v cukrovinkách nejčastěji objevují: oranžová (pomeranč), zelená (jablko), žlutá (citron) a červená (jahoda).

Pro získání celkové představy o aromatickém profilu vzorků byl sledován obsah přítomných těkavých (vonných) látek v souvislosti s jejich senzorickou kvalitou, resp. chutí/vůní, hlavní pozornost byla věnována přítomnosti potenciálně alergenních vonných látek. Pro stanovení vonných látek byla použita metoda HS-SPME-GC-MS, která se vyznačuje svou jednoduchostí, rychlostí a účinností provedení. Metoda byla optimalizována a validována především pro komplexní, jednoduché a rychlé stanovení alergenních vonných látek. Výsledky ukazují horší reprodukovatelnost, které bude věnována ještě pozornost v navazujících experimentech.

Pro senzorické hodnocení vzorků byly použity metody podle platných ČSN.

Jak vyplývá z informací na obalech, suroviny používané pro výrobu cukrovinek jsou z velké části stejné i u různých výrobců, a dalo by se předpokládat obdobné složení aromatického profilu. Nicméně mezi vzorky byly nalezeny výrazné rozdíly v počtu, druhu i obsahu těkavých sloučenin. To bude pravděpodobně způsobeno tím, že informace na obalu jsou poměrně nepřesné a obecné, legislativa povoluje pouhé označení přídatku termínem „aroma“, „ovocné aroma“, „šťávy“ nebo „koncentráty“ aj., z čehož není možné vyčíst údaje o množství přidávaných vonných látek.

Celkem bylo ve vzorcích předběžně identifikováno 393 těkavých sloučenin. Identifikace byla provedena na základě srovnání hmotnostních spekter s dostupnou knihovnou spekter, na základě porovnání s dostupnou literaturou a s databázemi aromatických látek lze tvrdit, že všechny identifikované sloučeniny jsou aromaticky aktivní, tj. vykazují vůni a mohou tak přispívat k aromatickému profilu vzorků cukrovinek. Obsah identifikovaných sloučenin byl zjišťován a porovnáván pouze semikvantitativně na základě ploch píků na chromatogramu.

Zároveň bylo ve vzorcích nalezeno 19 potenciálně alergenních vonných látek, konkrétně limonen, linalool, citral, citronellol, geraniol, isomethylionon, benzylalkohol, cinnamal, kumarin, amylcinnamal, cinnamylalkohol, benzylcinnamát, lyral, benzylbenzoát, farnesol, isoeugenol, benzylsalicylát, hexylcinnamal a eugenol. V tomto případě byla provedena přesná identifikace a kvantifikace pomocí příslušných standardů, v řadě případů byl nalezen obsah výrazně překračující limity stanovené pro kosmetické produkty.

Z výsledků této práce vyplývá, že v cukrovinkách se mohou nacházet vysoké koncentrace potenciálně alergenních vonných látek, přestože na obalu jsou skryty pod obecným termínem aroma. O jejich vlivu na zdraví, i vzhledem k obvykle malému konzumovanému množství, se lze jen dohadovat, přesto by bylo vhodné obsah těchto látek legislativně omezit i v případě potravin (popř. na ně alespoň upozornit na obalu výrobku).

6. SEZNAM POUŽITÝCH ZKRATEK

AAL	aromaticky aktivní látky
CI	Chemická ionizace
DI	Přímá sorpce
DI-SPME	Mikroextrakce pevnou fází ze vzorku
ECD	Detektor elektronového záchytu
EI	Elektronová ionizace
FID	Plamenový ionizační detektor
FPD	Plamenový fotometrický detektor
FTIR	Infračervená spektroskopie s Fourierovou transformací
GC	Plynová chromatografie
HPLC	Vysokoúčinná kapalinová chromatografie
HS	Headspace
HS-SPME	Mikroextrakce pevnou fází z prostoru nad vzorkem (headspace)
IT	Iontová past
LOD	Mez detekce
LOQ	Mez stavitelnosti
MS	Hmotnostní spektrometrie
NPD	Dusíko-fosforový detektor
PID	Fotoionizační detektor
Q	Kvadrupól
QqQ	Trojité kvadrupól
RSD	Relativní směrodatná odchylka
SD	Směrodatná odchylka
SDME	Mikroextrakce na jedné kapce
SFE	Extrakce nadkritickou tekutinou
SPE	Extrakce na pevné fázi
SPME	Mikroextrakce na pevné fázi
TCD	Tepelně-vodivostní detektor
TOF	Průletový analyzátor

7. SEZNAM CITOVANÝCH ZDROJŮ

- [1] ČOPÍKOVÁ, Jana. *Technologie čokolády a cukrovinek*. Praha: VŠCHT, 1999. ISBN 80-708-0365-7.
- [2] DRDÁK, Milan, Július STUDNICKÝ, Eva MÓROVÁ a Jolana KARKOVIČOVÁ. *Základy potravinářských technologií: spracovanie rastlinných a živočíšných surovín cereálne a fermentačné technológie uchovávanie, hygiena a ekológia potravín*. Bratislava: Malé centrum, 1996. ISBN 8096706411
- [3] Vyhláška, kterou se mění vyhláška č. 76/2003 Sb., kterou se stanoví požadavky pro přírodní sladidla, med, cukrovinky, kakaový prášek a směsi kakaa s cukrem, čokoládu a čokoládové bonbony. In: *Sbírka zákonů*. Česká republika, 2005. Dostupné také z: <https://www.zakonyprolidi.cz/cs/2005-43>
- [4] DOSTÁLOVÁ, Jana a Pavel KADLEC. *Potravinářské zbožížnalství: technologie potravin*. Ostrava: Key Publishing, 2014. Monografie (Key Publishing). ISBN 978-80-7418-208-2.
- [5] Vyhláška č. 4/2008 Sb., kterou se stanoví druhy a podmínky použití přídatných látek a extrakčních rozpouštědel při výrobě potravin. In: *Sbírka zákonů*. Česká republika, 2018. Dostupné také z: <https://www.zakonyprolidi.cz/cs/2008-4>
- [6] SKOUPIL, Jan. *Suroviny a polotovary pro cukrářskou výrobu*. Brno: Společenstvo cukrářů České republiky, 2005. ISBN 802396061X.
- [7] GABROVSKÁ, Dana a Markéta CHÝLKOVÁ. *Sladká fakta o cukrech a sladidlech, aneb, Čím si osladit život*. Praha: Potravinářská komora České republiky, Česká technologická platforma pro potraviny, 2017. ISBN 978-80-88019-17-6.
- [8] KOCOVAR, Markéta a Luděk ŠÍDLO. Diabetes mellitus - hrozba pro jednotlivce i pro celou společnost. *Demografie* [online]. 2014, **56**(2), 160-171 [cit. 2017-02-15]. ISSN 1805-2991. Dostupné z: https://www.czso.cz/documents/10180/20555383/130053_14-02.pdf/
- [9] KLESCHT, Vladimír, Iva HRNČÍŘÍKOVÁ a Lucie MANDELOVÁ. *Éčka v potravinách*. Brno: Computer Press, 2006. Zdraví pro každého (Computer Press). ISBN 8025112926.
- [10] ČÍŽ, Karel. Alternativní sladidla. *Listy cukrovarnické a řepařské*. 2008, **124**(9/10), 278-279.
- [11] RAČICKÁ, Eva. Náhradní sladidla, jejich místo v současné diabetologii. *Interní medicína pro praxi*. 2012, **14**(8–9), 331–335.
- [12] BABIČKA, Luboš. *Přídatné látky v potravinách: publikace České technologické platformy pro potraviny*. Praha: Potravinářská komora České republiky, Česká technologická platforma pro potraviny, 2012. ISBN 9788090509634.
- [13] ARMISÉN, R. a F. GAIATAS. Agar. *Handbook of Hydrocolloids* [online]. 2. Sawston: Elsevier, 2009, 2009, s. 82-107 [cit. 2019-03-19]. DOI: 10.1533/9781845695873.82. ISBN 9781845694142. Dostupné z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9781845694142500047>

- [14] POPPE, J. Gelatin. IMESON, Alan, ed. *Thickening and Gelling Agents for Food* [online]. 1. Boston, MA: Springer US, 1992, 1992, s. 98-123 [cit. 2019-03-19]. DOI: 10.1007/978-1-4615-3552-2_5. ISBN 978-1-4613-6577-8. Dostupné z: http://link.springer.com/10.1007/978-1-4615-3552-2_5
- [15] MICHALOVÁ, Irena. *Značky a informace na potravinách*. Praha: Sdružení českých spotřebitelů, c2006. Průvodce spotřebitele. ISBN 80-239-6652-9.
- [16] BURDOCK, George A. *Encyclopedia of food and color additives*. Boca Raton: CRC Press, c1997. ISBN 9780849394164.
- [17] *Český lékopis: Pharmacopoea bohemica*. 1. Praha: Grada Publishing, 2017. ISBN 9788027105007.
- [18] VELÍŠEK, Jan a Jana HAJŠLOVÁ. *Chemie potravin*. Rozš. a přeprac. 3. vyd. Tábor: OSSIS, 2009. ISBN 9788086659169.
- [19] VÍTOVÁ, Eva. Senzorická analýza – důležitý nástroj pro zvyšování kvality potravin. In: *Chempoint: Vědci pro průmysl a praxi* [online]. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, 2019 [cit. 2019-03-22]. Dostupné z: <http://www.chempoint.cz/vitova>
- [20] FURIA, Thomas E. *CRC Handbook of Food Additives*. 2. California: CRC-Press, 1973. ISBN 13: 9780849305429.
- [21] ODSTRČIL, Jaroslav a Milada ODSTRČILOVÁ. *Chemie potravin*. Brno: Národní centrum ošetřovatelství a nelékařských zdravotnických oborů, 2006. ISBN 8070134356.
- [22] HUTCHINGS, John B. *Food colour and appearance*. London: Blackie Academic & Professional, 1994. ISBN 0751401765.
- [23] TOLDRA, Fidel a Leo M.L. NOLLE. *Handbook of Food Analysis* [online]. 3. Boca Raton: CRC-Press, 2015 [cit. 2019-03-25]. ISBN 9781482297843. Dostupné z: <https://www.taylorfrancis.com/books/e/9781482297843>
- [24] Syntetické vonné a chuťové látky. *Chemické listy* [online]. 1999, **93**(7), 412-420 [cit. 2019-03-27]. Dostupné z: http://www.chemicke-listy.cz/docs/full/1999_07_412-420.pdf
- [25] CEJPEK, Karel. Vonné a chuťové složky sadů. *Chemické listy* [online]. 2014, **108**(5), 426-435 [cit. 2017-05-02]. Dostupné z: http://www.chemicke-listy.cz/docs/full/2014_05_426-435.pdf
- [26] PELIKÁN, Miloš, Luděk HŘIVNA a Josef HUMPOLA. *Technologie sacharidů*. Brno: Mendelova zemědělská a lesnická univerzita, 1999. ISBN 8071574074.
- [27] TAUFEROVÁ, Alexandra. *Technologie a hygiena potravin rostlinného původu I., II.* Brno: Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, 2014. ISBN 978-80-7305-692-6.
- [28] PAULIŠOVÁ, S. Obsah aromaticky aktivních látek v nečokoládových cukrovinkách. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, 2018. 42 s. Vedoucí bakalářské práce Ing. Eva Vítová, Ph.D.

- [29] SIEGMUND, B. Biogenesis of aroma compounds. *Flavour Development, Analysis and Perception in Food and Beverages* [online]. 1. Sawston: Elsevier, 2015, 2015, s. 127-149 [cit. 2019-04-04]. DOI: 10.1016/B978-1-78242-103-0.00007-2. ISBN 9781782421030. Dostupné z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9781782421030000072>
- [30] HADAČOVÁ, Eva. *Látky upravující chuť a vůni potravin*. Lednice, 2009. Bakalářská práce. Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně. Vedoucí práce Ing. Josef Balík Ph.D.
- [31] FRECHOVÁ, V. Stanovení aromaticky aktivních látek ve vybraných typech ovoce. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, 2011. 102 s. Vedoucí diplomové práce Ing. Eva Vítová, Ph.D.
- [32] SCHWAB, Wilfried, Rachel DAVIDOVICH-RIKANATI a Efraim LEWINSOHN. Biosynthesis of plant-derived flavor compounds. *The Plant Journal* [online]. 2008, **54**(4), 712-732 [cit. 2019-04-04]. DOI: 10.1111/j.1365-313X.2008.03446.x. ISSN 0960-7412. Dostupné z: <http://doi.wiley.com/10.1111/j.1365-313X.2008.03446.x>
- [33] Nařízení evropského parlamentu a Rady (ES) č. 1334/2008 ze dne 16. prosince 2008 o látkách určených k aromatizaci a některých složkách potravin vyznačujících se aromatem pro použití v potravinách nebo na jejich povrchu a o změně nařízení Rady (EHS) č. 1601/91, nařízení (ES) č. 2232/96 a č. 110/2008 a směrnice 2000/13/ES. In: EUR-Lex [právní informační systém], 2008, ročník 1. Dostupné také z: <https://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2008:354:0034:0050:CS:PDF>
- [34] BECKSTROM-STERMBERG, Stephen M. a James A. DUKE. *CRC handbook of medicinal mints (Aromathematics): phytochemicals and biological activities*. 1. Boca Raton: CRC Press, c1996. ISBN 9780849326653.
- [35] SPILKOVÁ, Jiřina. *Farmakognozie*. Praha: Univerzita Karlova v Praze, nakladatelství Karolinum, 2016. ISBN 9788024632643.
- [36] Nařízení evropského parlamentu a rady (ES) č. 1223/2009: ze dne 30. listopadu 2009 o kosmetických přípravcích. Úřední věstník Evropské unie, [online] 22. 12. 2009 [cit. 2017-02-25]. Dostupné z: <http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2009:342:0059:0209:cs:PDF>
- [37] Epikutánní testy. KRATOCHVÍL, F. Epikutánní testy: Abecední seznam ICDRG autorizovaných alergenů [online]. 2007 [cit. 2019-03-25]. Dostupné z: <http://www.epitesty.cz/default.asp?inc=sez&filtr=A>
- [38] TRUCHLIŃSKI, Jerzy, Iwona SEMBRATOWICZ, Małgorzata GORZEL a Anna KIEŁTYKA-DADASIEWICZ. Allergenic potential of cosmetic ingredients. *Archives of Physiotherapy and Global Researches* [online]. 2014, **18**(1), 7-15 [cit. 2019-03-30]. DOI: 10.15442/apgr.19.2.1. ISSN 23534389. Dostupné z: <http://apgr.wssp.edu.pl/allergenic-potential-of-cosmetic-ingredients/>
- [39] The PubChem Project. *National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine* [online]. USA, 2005 [cit. 2019-3-31]. Dostupné z: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

- [40] DUSSAULT, Deanna. *Ganja yoga: a practical guide to conscious relaxation, soothing pain relief, and enlightened self-discovery*. New York, NY: HarperOne, an imprint of HarperCollinsPublishers, [2017]. ISBN 0062656848.
- [41] HÁLKOVÁ, Jana, Marie RUMÍŠKOVÁ a Jana RIEGLOVÁ. *Analýza potravin*. 2. vyd. Újezd u Brna: I. Straka, 2001. ISBN 8086494020.
- [42] ŠTĚRBA, Karel, Pavel DOSTÁLEK a Marcel KARABÍN. Moderní postupy využívané při přípravě vzorků pro stanovení alkoholů, esterů a kyselin v pivu. *Chemické listy* [online]. 2011, **105**(8), 603-610 [cit. 2019-04-11]. Dostupné z: http://www.chemicke-listy.cz/docs/full/2011_08_603-610.pdf
- [43] KADLEC, Pavel, Karel MELZUCH a Michal VOLDŘICH. *Procesy a zařízení v potravinářství a biotechnologiích*. Ostrava: Key Publishing, 2013. Monografie (Key Publishing). ISBN 978-80-7418-163-4.
- [44] BÍLEK, Tomáš. *Využití GC a SPME v analýze přírodních látek*. Hradec Králové, 2013. Disertační práce. Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové. Vedoucí práce Prof. RNDr. Luděk Jahodář, CSc.
- [45] CHAINTREAU, Alain. Simultaneous distillation-extraction: from birth to maturity-review. *Flavour and Fragrance Journal* [online]. 2001, **16**(2), 136-148 [cit. 2019-04-08]. DOI: 10.1002/ffj.967. ISSN 0882-5734. Dostupné z: <http://doi.wiley.com/10.1002/ffj.967>
- [46] KLOUDA, Pavel. *Moderní analytické metody*. 2., upr. a dopl. vyd. Ostrava: Pavel Klouda, 2003. ISBN 8086369072.
- [47] CHURÁČEK, Jaroslav. *Analytická separace látek: celostátní vysokoškolská učebnice pro vysoké školy chemickotechnologické*. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1990. ISBN 80-03-00569-8.
- [48] LOJKOVÁ, Lea a Jiří VEJROSTA. Extrakce iontů kovů a organokovových sloučenin nadkritickou tekutinou. *Chemické listy* [online]. 1998, **92**(12), 988-997 [cit. 2019-04-10]. Dostupné z: <http://www.chemicke-listy.cz/ojs3/index.php/chemicke-listy/article/view/2645/2645>
- [49] HORÁK, Tomáš, Jiří ČULÍK, Marie JURKOVÁ, Pavel ČEJKA, Vladimír KELLNER, Josef DVOŘÁK a Danuša HAŠKOVÁ. Možnosti využití moderních metod přípravy vzorků pro plynově chromatografické analýzy při analýze nápojů a zejména piva. *Kvasný průmysl* [online]. 2010, **56**(9), 358-366 [cit. 2019-04-11]. Dostupné z: https://kvasnyprumysl.cz/artkey/kpr-201009-0001_Moznosti_vyuziti_modernich_metod_pripravy_vzorku_pro_plynove_chromatograficke_analyzy_pri_analyze_napoju_a_zejm.php
- [50] Basic headspace sampling techniques. In: *Chemistry LibreTexts* [online]. California: LibreTexts, 2016 [cit. 2019-04-10]. Dostupné z: <https://chem.libretexts.org/>
- [51] BORŮVKOVÁ, T. Stanovení reziduálních látek z přípravy koloidních systémů na bázi biopolymerů. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, 2014. 55 s. Vedoucí bakalářské práce Ing. Filip Mravec, Ph.D.

- [52] JELEŇ, Henryk H., Małgorzata MAJCHER a Mariusz DZIADAS. Microextraction techniques in the analysis of food flavor compounds. *Analytica Chimica Acta* [online]. 2012, **738**, 13-26 [cit. 2019-04-14]. DOI: 10.1016/j.aca.2012.06.006. ISSN 00032670. Dostupné z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0003267012008513>
- [53] HAKKARAINEN, Minna. Developments in multiple headspace extraction. *Journal of Biochemical and Biophysical Methods* [online]. 2007, **70**(2), 229-233 [cit. 2019-04-15]. DOI: 10.1016/j.jbbm.2006.08.012. ISSN 0165022X. Dostupné z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0165022X06001941>
- [54] PÉREZ PAVÓN, José Luis, Sara HERRERO MARTÍN, Carmelo GARCÍA PINTO a Bernardo MORENO CORDERO. Determination of trihalomethanes in water samples: A review. *Analytica Chimica Acta* [online]. 2008, **629**(1-2), 6-23 [cit. 2019-04-15]. DOI: 10.1016/j.aca.2008.09.042. ISSN 00032670. Dostupné z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0003267008016589>
- [55] BICCHI, C., C. CORDERO a P. RUBIOLO. A Survey on High-Concentration-Capability Headspace Sampling Techniques in the Analysis of Flavors and Fragrances. *Journal of Chromatographic Science* [online]. 2004, **42**(8), 402-409 [cit. 2019-04-15]. DOI: 10.1093/chromsci/42.8.402. ISSN 0021-9665. Dostupné z: <https://academic.oup.com/chromsci/article-lookup/doi/10.1093/chromsci/42.8.402>
- [56] ŠÍSTKOVÁ, I., A. HAUBELTOVÁ, V. POHŮNEK a H. ČÍŽKOVÁ. Identifikace senzoricky aktivních látek minerálních vod s citronovou příchutí pomocí plynové chromatografie s olfaktometrickým detektorem. *Chemické listy* [online]. 2017, **111**(5), 343-348 [cit. 2019-04-17]. Dostupné z: <http://www.chemicke-listy.cz/ojs3/index.php/chemicke-listy/article/view/84>
- [57] VOLKA, Karel. *Analytická chemie*. Praha: Vysoká škola chemicko-technologická, 1995. ISBN 8070802278.
- [58] HOLČAPEK, Michal. Spojení MS a separačních technik [online]. 2018 [cit. 2019-04-16]. Dostupné z: http://holcapek.upce.cz/teaching/09_Spojeni_MS_separace.pdf
- [59] POKORNÝ, Jan, Zdeňka PANOVSÁ a Helena VALENTOVÁ. *Senzorická analýza potravin*. Praha: Vysoká škola chemicko-technologická, 1998. ISBN 8070803290.
- [60] JEŽEK, František. *Senzorická analýza potravin: návody na cvičení*. Brno: Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, 2014. ISBN 978-80-7305-724-4.
- [61] MEILGAARD, Morten, Gail Vance CIVILLE a B. Thomas CARR. *Sensory evaluation techniques*. 4th ed. Boca Raton: Taylor & Francis, c2007. ISBN 9780849338397.
- [62] JAROŠOVÁ, Alžběta. *Senzorické hodnocení potravin*. V Brně: Mendelova zemědělská a lesnická univerzita, 2001. ISBN 80-7157-539-9.
- [63] KOUBEK, M. Optimalizace a validace GC-MS metody pro stanovení těkavých aromatických látek v sýrech. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, 2016. 65 s. Vedoucí bakalářské práce Ing. Eva Vítová, Ph.D.

- [64] PECINOVÁ, E. Aromaticky aktivní látky vybraných druhů léčivých rostlin. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, 2017. 105 s. Vedoucí diplomové práce Ing. Eva Vítová, Ph.D.
- [65] MOTÚZOVÁ, E. Vliv aromaticky aktivních látek na senzorickou kvalitu nečokoládových cukrovinek. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, 2018. 112 s. Vedoucí diplomové práce Ing. Eva Vítová, Ph.D.
- [66] SUCHÁNEK, Miloslav a David MILDE, ed. Názvosloví analytického měření: úvod do 3. vydání Mezinárodního metrologického slovníku ; Jak vyhovět požadavkům ISO 17025 na verifikaci metod. 1. Praha: Eurachem - ČR, c2013. Kvalimetrie. ISBN 8086322068.
- [67] POHANKA, Miroslav. Základy statistiky laboratorních experimentů. *Vojenské zdravotnické listy* [online]. 2010, **79**(2), 60-63 [cit. 2019-05-05]. Dostupné z: https://www.mmsl.cz/artkey/mms-201002-0005_introduction-to-laboratory-experiments-statistics.php
- [68] BURDOCK, George A. *Fenaroli's handbook of flavor ingredients*. 6. Boca Raton: CRC Press, 2010. ISBN 9781420090772.
- [69] VERMA, Deepak Kumar a Prem Prakash SRIVASTAV. *Science and technology of aroma, flavor, and fragrance in rice*. 1. Waretown, NJ: Apple Academic Press, [2018]. ISBN 1351360388.
- [70] JOVANOVIĆ, Olga, Niko RADULOVIĆ, Radosav PALIĆ a Bojan ZLATKOVIĆ. Volatiles of *Minuartia recurva* (All.) Schinz et Thell. subsp. *recurva* (Caryophyllaceae) From Serbia. *Journal of Essential Oil Research* [online]. 2009, **21**(5), 429-432 [cit. 2019-05-02]. DOI: 10.1080/10412905.2009.9700209. ISSN 1041-2905. Dostupné z: <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/10412905.2009.9700209>
- [71] BREITMAIER, Eberhard. *Terpenes: Flavors, Fragrances, Pharmaca, Pheromones*. 1. Weinheim: Wiley-VCH, 2006. ISBN 9783527609949.
- [72] HUI, Y. H., Feng CHEN a Leo M. L. NOLLET. *Handbook of Fruit and Vegetable Flavors*. 1. New Jersey: Wiley-VCH, 2010. ISBN 9781118031858.
- [73] HOUDKOVÁ, Markéta. Vapours of essential oils and their constituents as in vitro inhibitors of pneumonia causing microorganisms. Praha, 2018. Dizertační práce. Fakulta tropického zemědělství ČZU.
- [74] BRISCIONE, James a Brooke PARKHURST. *The flavor matrix: the art and science of pairing common ingredients to create extraordinary dishes*. 1. New York: Houghton Mifflin Harcourt, 2018. ISBN 9780544809963.
- [75] LALEL, Herianus J.D, Zora SINGH a Soon Chye TAN. Aroma volatiles production during fruit ripening of 'Kensington Pride' mango. *Postharvest Biology and Technology* [online]. 2003, **27**(3), 323-336 [cit. 2019-05-03]. DOI: 10.1016/S0925-5214(02)00117-5. ISSN 09255214. Dostupné z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0925521402001175>

8. SEZNAM PŘÍLOH

- Příloha 1: Formulář pro senzorické hodnocení*
- Příloha 2: Chromatogram těkavých látek ve vzorku A01*
- Příloha 3: Chromatogram těkavých látek ve vzorku A02*
- Příloha 4: Chromatogram těkavých látek ve vzorku A03*
- Příloha 5: Chromatogram těkavých látek ve vzorku A04*
- Příloha 6: Chromatogram těkavých látek ve vzorku B01*
- Příloha 7: Chromatogram těkavých látek ve vzorku B02*
- Příloha 8: Chromatogram těkavých látek ve vzorku B03*
- Příloha 9: Chromatogram těkavých látek ve vzorku B04*
- Příloha 10: Chromatogram těkavých látek ve vzorku C01*
- Příloha 11: Chromatogram těkavých látek ve vzorku C02*
- Příloha 12: Chromatogram těkavých látek ve vzorku C03*
- Příloha 13: Chromatogram těkavých látek ve vzorku C04*
- Příloha 14: Chromatogram těkavých látek ve vzorku D01*
- Příloha 15: Chromatogram těkavých látek ve vzorku D02*
- Příloha 16: Chromatogram těkavých látek ve vzorku D03*
- Příloha 17: Chromatogram těkavých látek ve vzorku E01*
- Příloha 18: Chromatogram těkavých látek ve vzorku E02*
- Příloha 19: Chromatogram těkavých látek ve vzorku E03*
- Příloha 20: Slovní hodnocení barvy vzorků oranžové barvy*
- Příloha 21: Slovní hodnocení barvy vzorků zelené barvy*
- Příloha 22: Slovní hodnocení barvy vzorků žluté barvy*
- Příloha 23: Slovní hodnocení barvy vzorků červené barvy*
- Příloha 24: Slovní hodnocení vůně oranžových vzorků*
- Příloha 25: Slovní hodnocení vůně zelených vzorků*
- Příloha 26: Slovní hodnocení vzorků žluté barvy*
- Příloha 27: Slovní hodnocení vůně vzorků červené barvy*
- Příloha 28: Slovní hodnocení chuti oranžových vzorků*
- Příloha 29: Slovní hodnocení chuti zelených vzorků*
- Příloha 30: Slovní hodnocení chutí žlutých vzorků*
- Příloha 31: Slovní hodnocení chuti červených vzorků*
- Příloha 32: Slovní hodnocení celkové přijatelnosti vzorků oranžové barvy*
- Příloha 33: Slovní hodnocení celkové přijatelnosti vzorků zelené barvy*
- Příloha 34: Slovní hodnocení celkové přijatelnosti vzorků žluté barvy*

Příloha 35: Slovní hodnocení celkové přijatelnosti vzorků červené barvy

9. PŘÍLOHY

Příloha 1: Formulář pro senzorické hodnocení

DOTAZNÍK PRO SENZORICKÉ HODNOCENÍ NEČOKOLÁDOVÝCH CUKROVINEK

Vážení hodnotitelé,

Zhodnoťte, prosím, předložené vzorky dropsů.

Hodnotitel: _____
Datum: _____
Čas: _____

Zdravotní stav:
kuřák/nekuřák
žena/muž

Jaké je Vaše stanovisko před ochutnáváním?

- dropsy mám velmi rád/a
- dropsy nemám příliš rád/a
- dropsy nemám vůbec rád/a.

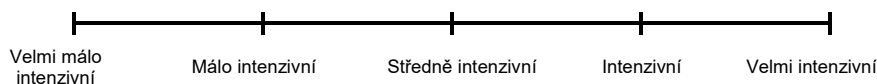
Zhodnoťte předložené vzorky v následujících znacích, použijte uvedené stupnice, svá hodnocení zapište do uvedené tabulky.

1. Barva

Kód vzorku	Barva

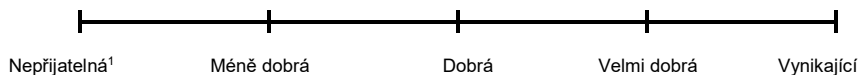
Intenzita barvy

Kód vzorku:



Příjemnost barvy

Kód vzorku:



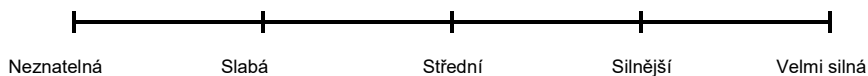
Pzn.: 1 – nehomogenní, výrazně netypická, cizí odstín, barevné skvrny, příp. jiné výrazné vady

2. Vůně (aroma)

Kód vzorku	Popis vůně

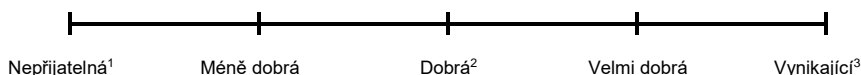
Intenzita vůně

Kód vzorku:



Příjemnost vůně

Kód vzorku:



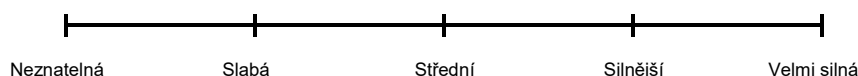
Pzn.: 1 – nepříjemná, netypická, výrazně negativní přípach; 2 – mírné odchylky od stupně „Vynikající“, méně výrazná; 3 – výrazná, charakteristická (lze dobře identifikovat), příjemná, harmonická

3. Chuť (flavour = komplexní pocit v ústech při konzumaci)

Kód vzorku	Popis chutě

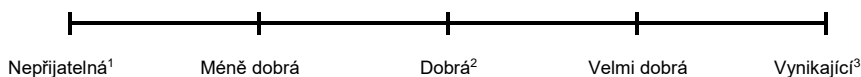
Intenzita chuti

Kód vzorku:



Příjemnost chuti

Kód vzorku:



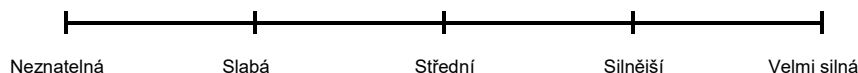
Pzn.: 1 – nepříjemná, netypická, výrazně negativní přípach; 2 – mírné odchylky od stupně „Vynikající“, méně výrazná; 3 – výrazná, charakteristická (lze dobře identifikovat), příjemná, harmonická

4. Profilový test vybraných chutí

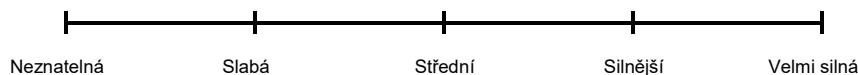
Posuďte, do jaké míry uvedené dílčí chutě vytvářejí celkový dojem chuti. Použijte stupnici.

Kód vzorku:

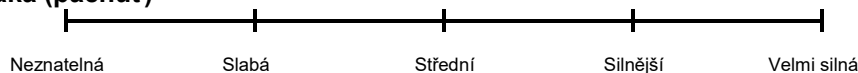
Sladká



Kyselá



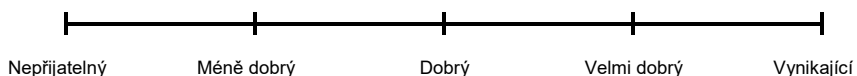
Jiná uveďte jaká (pachut')



Hodnocení celkové přijatelnosti vzorku

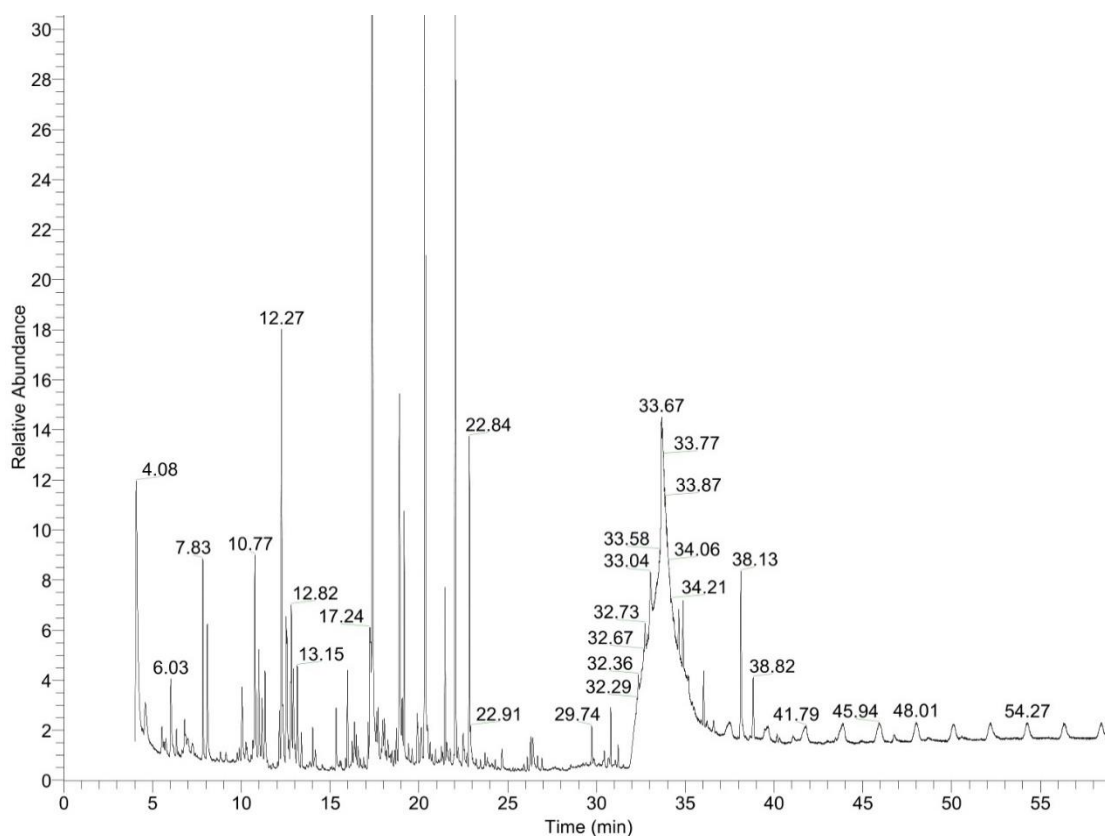
Celkově byste vzorek hodnotili jako: (berte v úvahu všechny výše zmíněné vlastnosti, s důrazem především na chuť a vůni).

Kód vzorku:

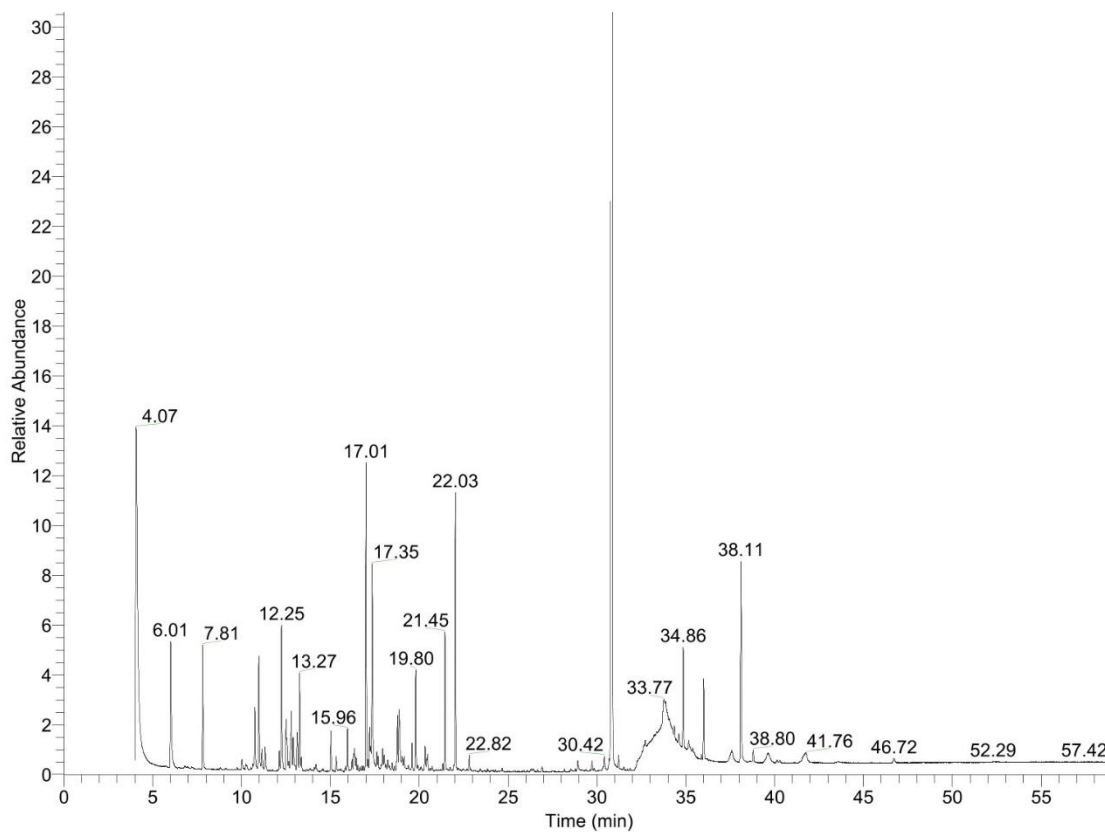


Proč? _____

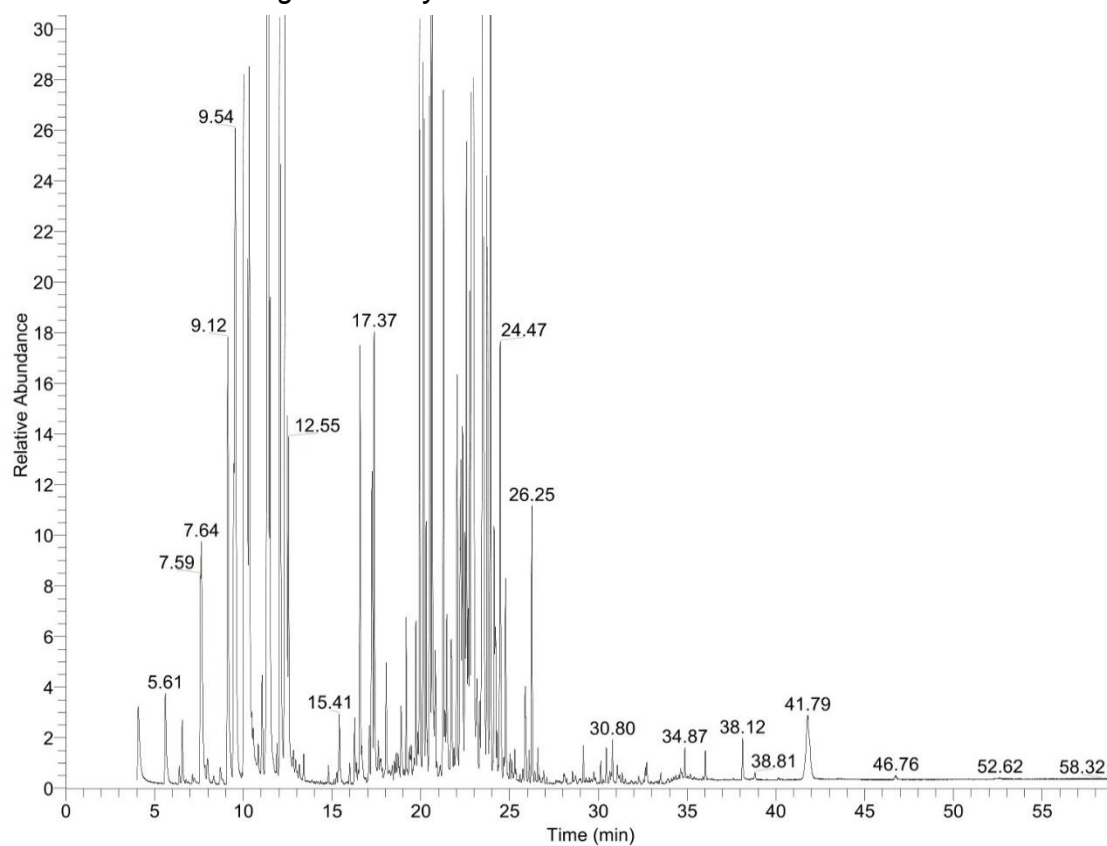
Příloha 2: Chromatogram těkavých látek ve vzorku A01



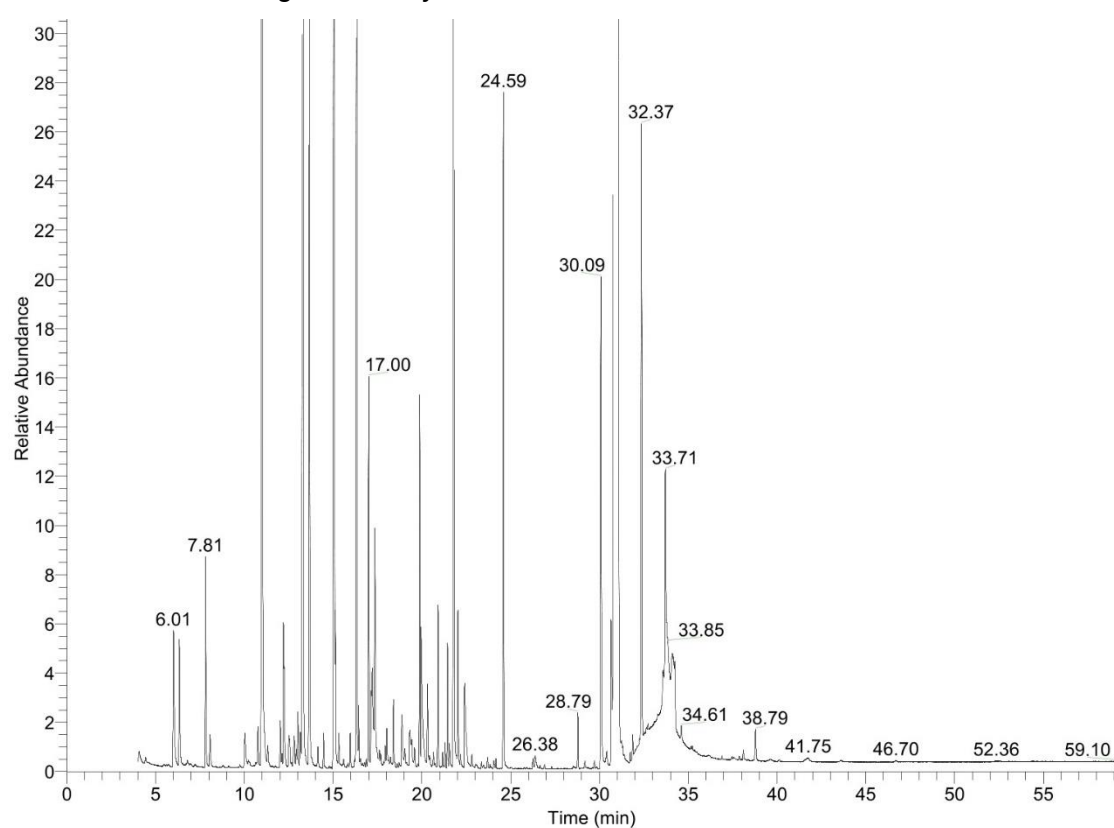
Příloha 3: Chromatogram těkavých látek ve vzorku A02



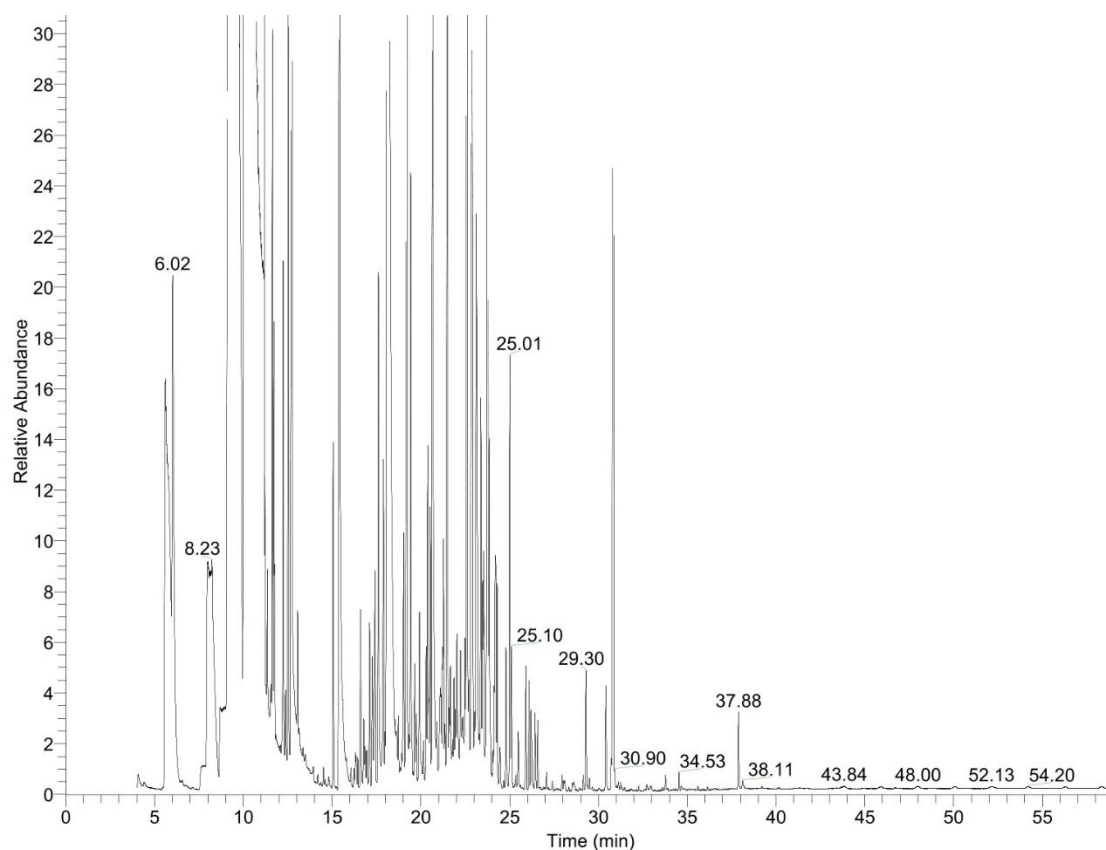
Příloha 4: Chromatogram těkavých látek ve vzorku A03



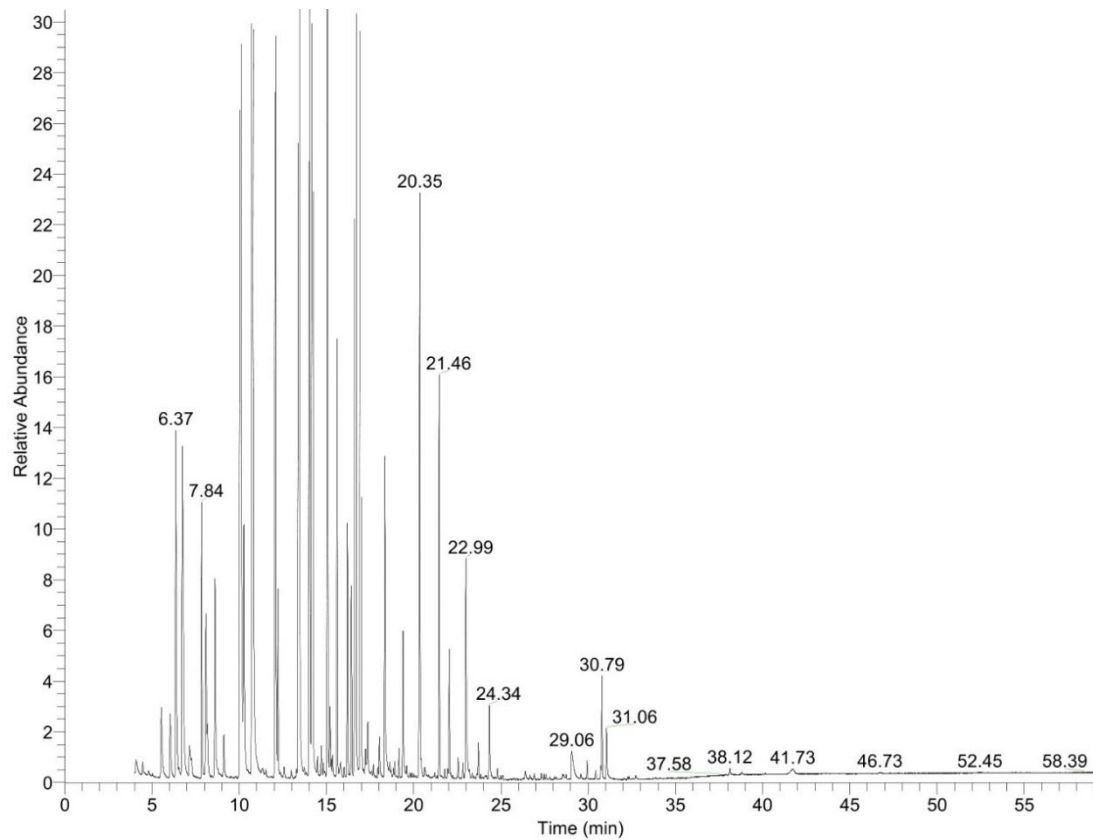
Příloha 5: Chromatogram těkavých látek ve vzorku A04



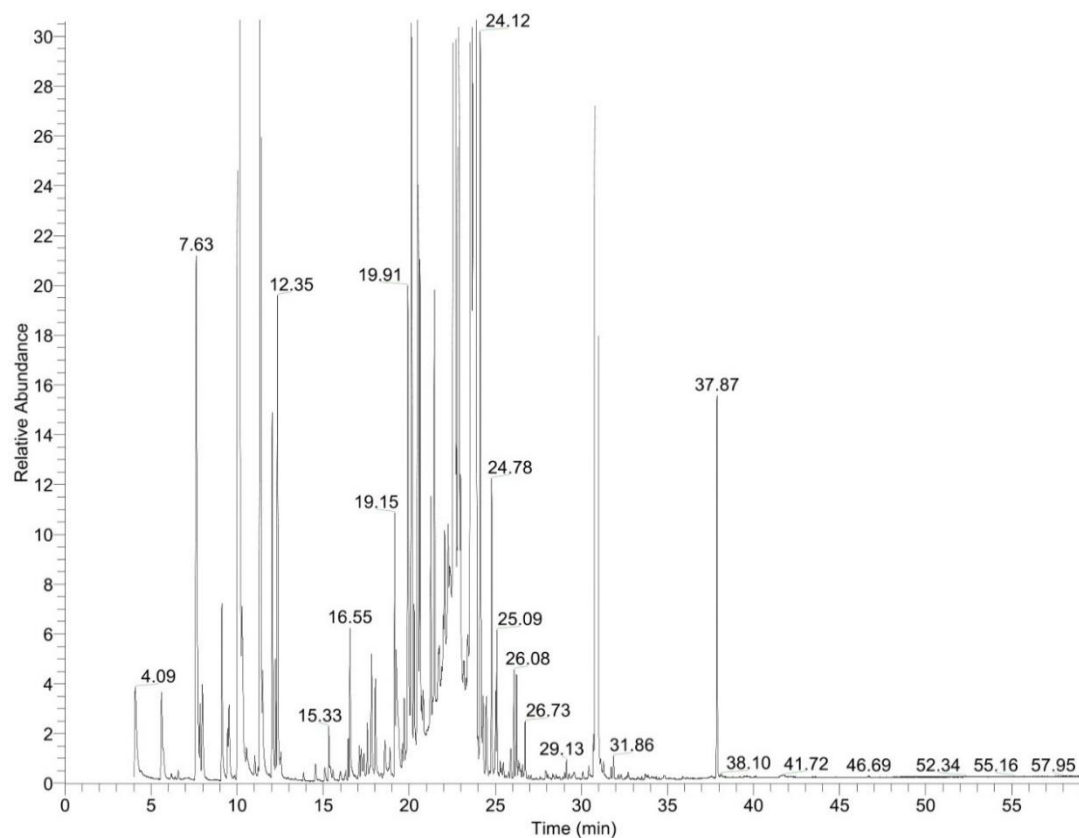
Příloha 6: Chromatogram těkavých látek ve vzorku B01



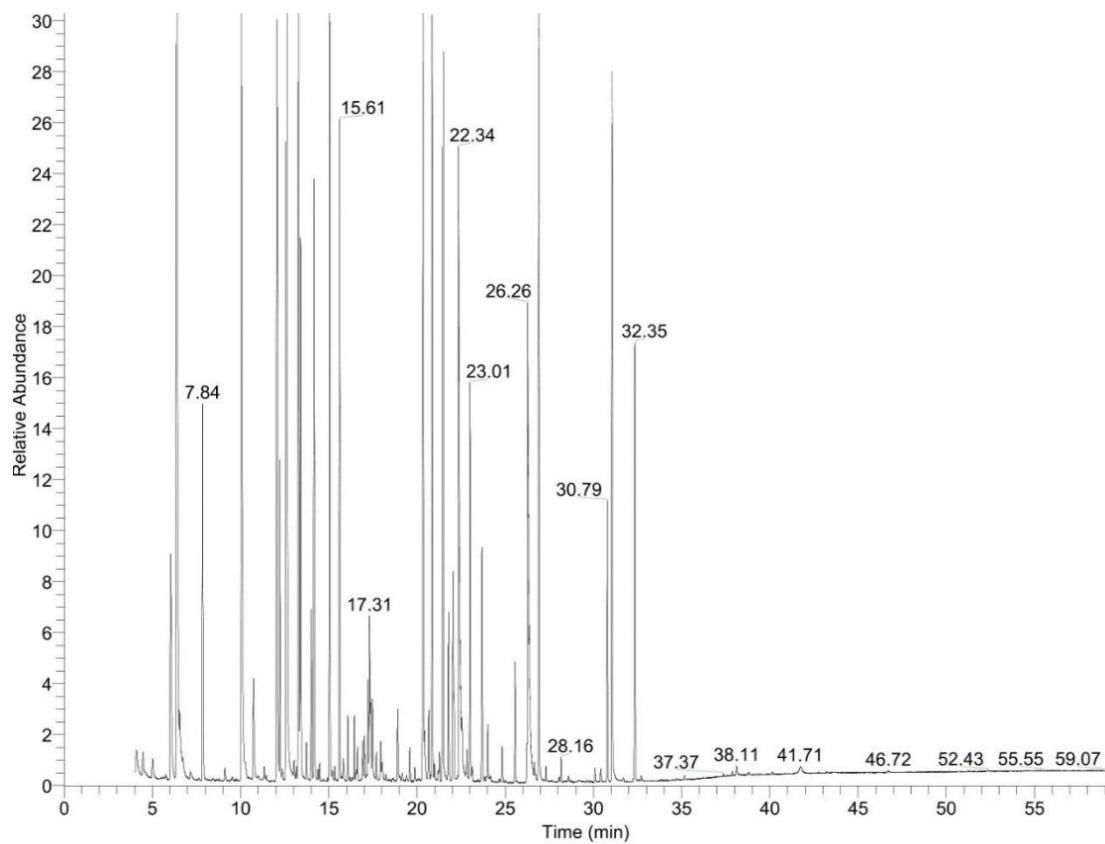
Příloha 7: Chromatogram těkavých látek ve vzorku B02



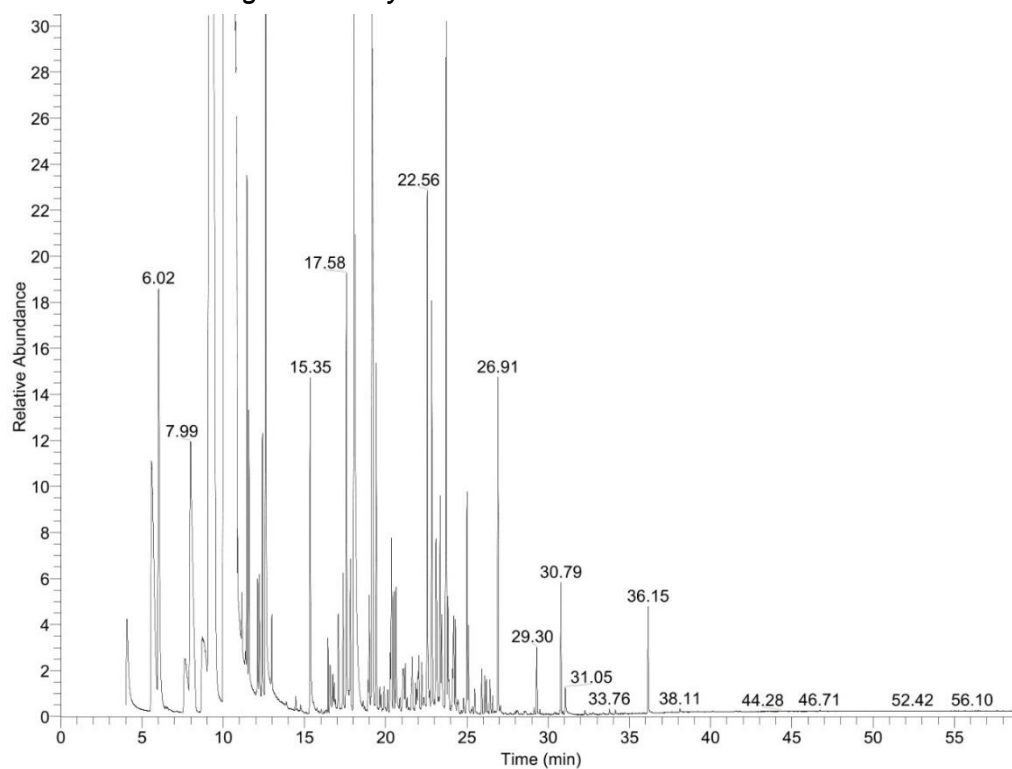
Příloha 8: Chromatogram těkavých látek ve vzorku B03



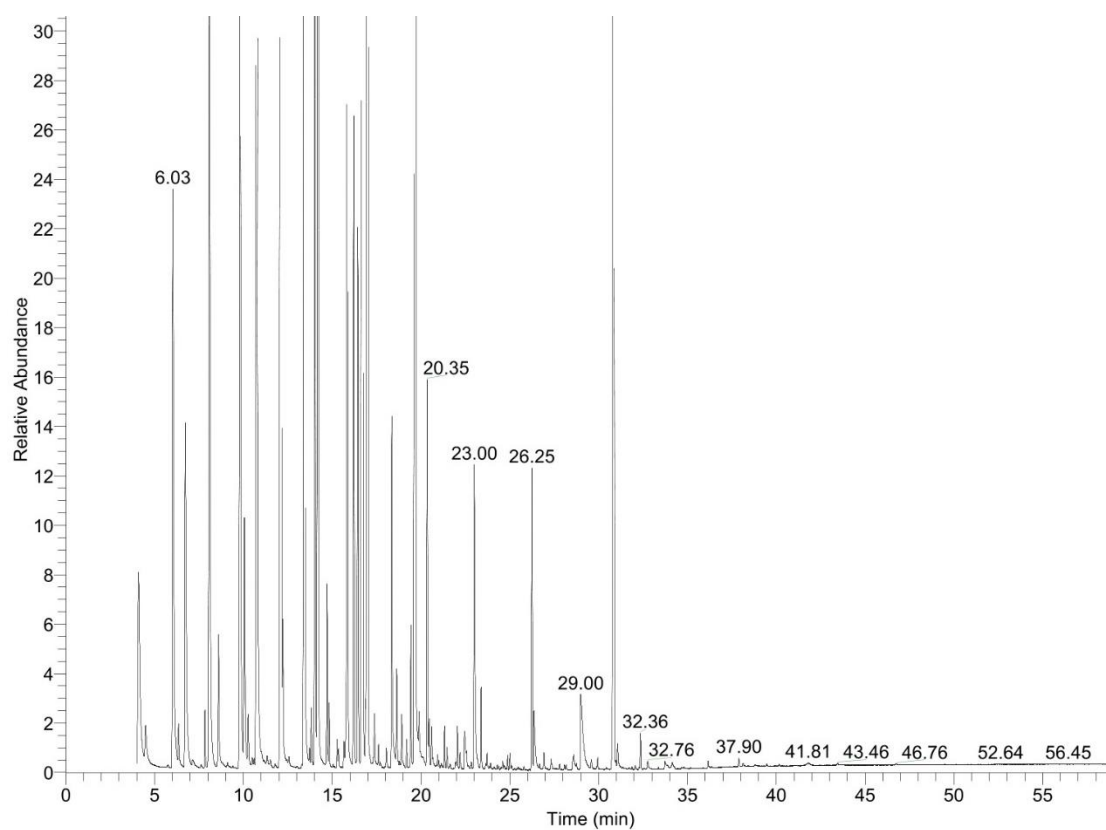
Příloha 9: Chromatogram těkavých látek ve vzorku B04



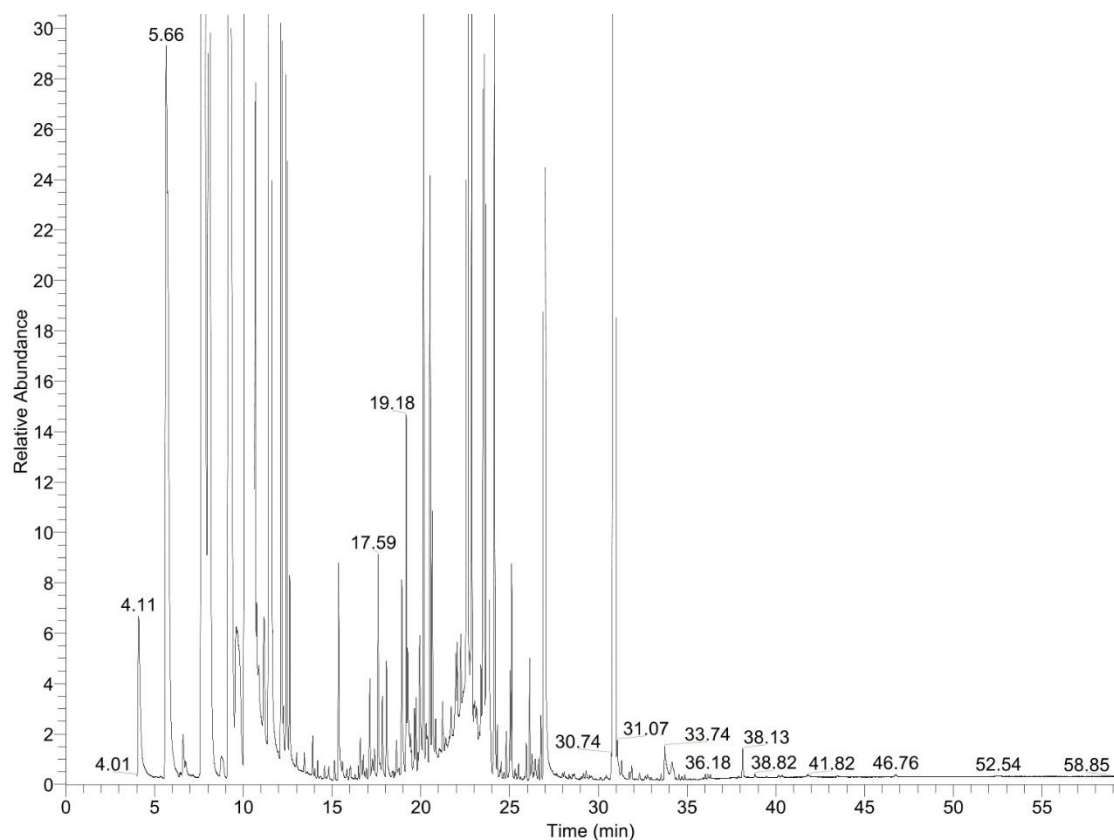
Příloha 10: Chromatogram těkavých látek ve vzorku C01



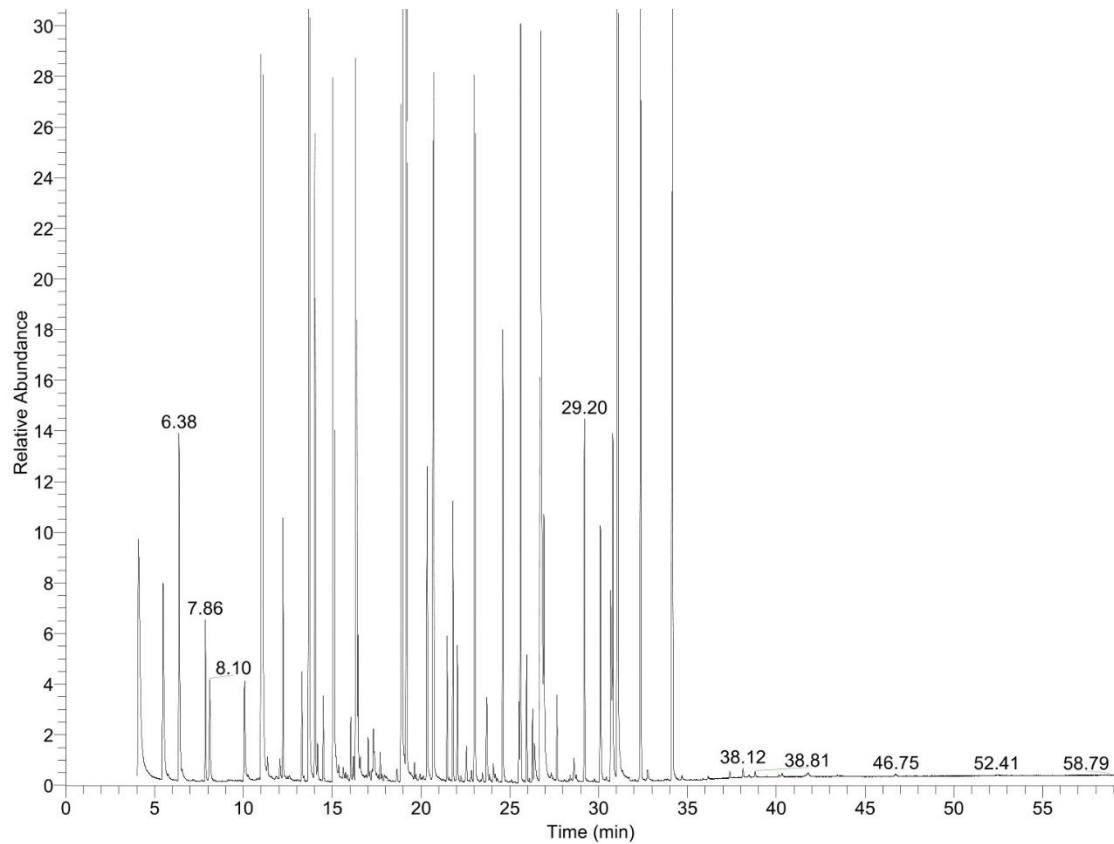
Příloha 11: Chromatogram těkavých látek ve vzorku C02



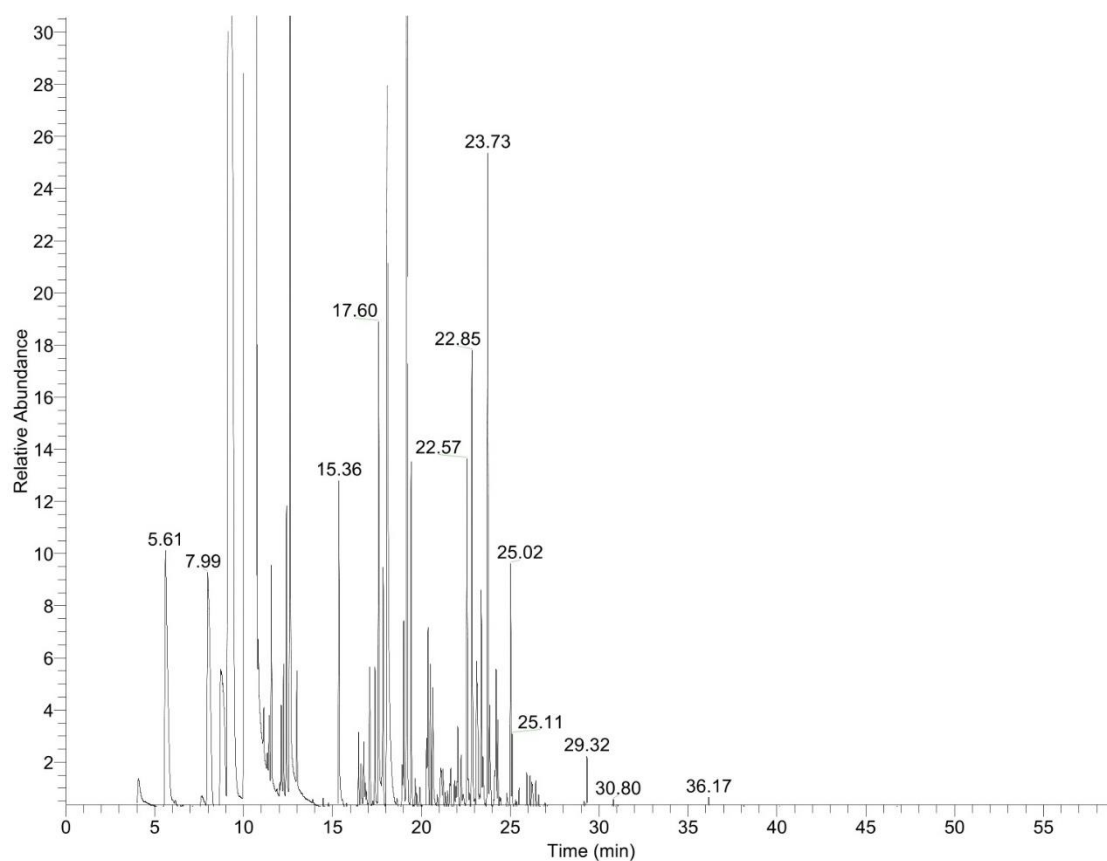
Příloha 12: Chromatogram těkavých látek ve vzorku C03



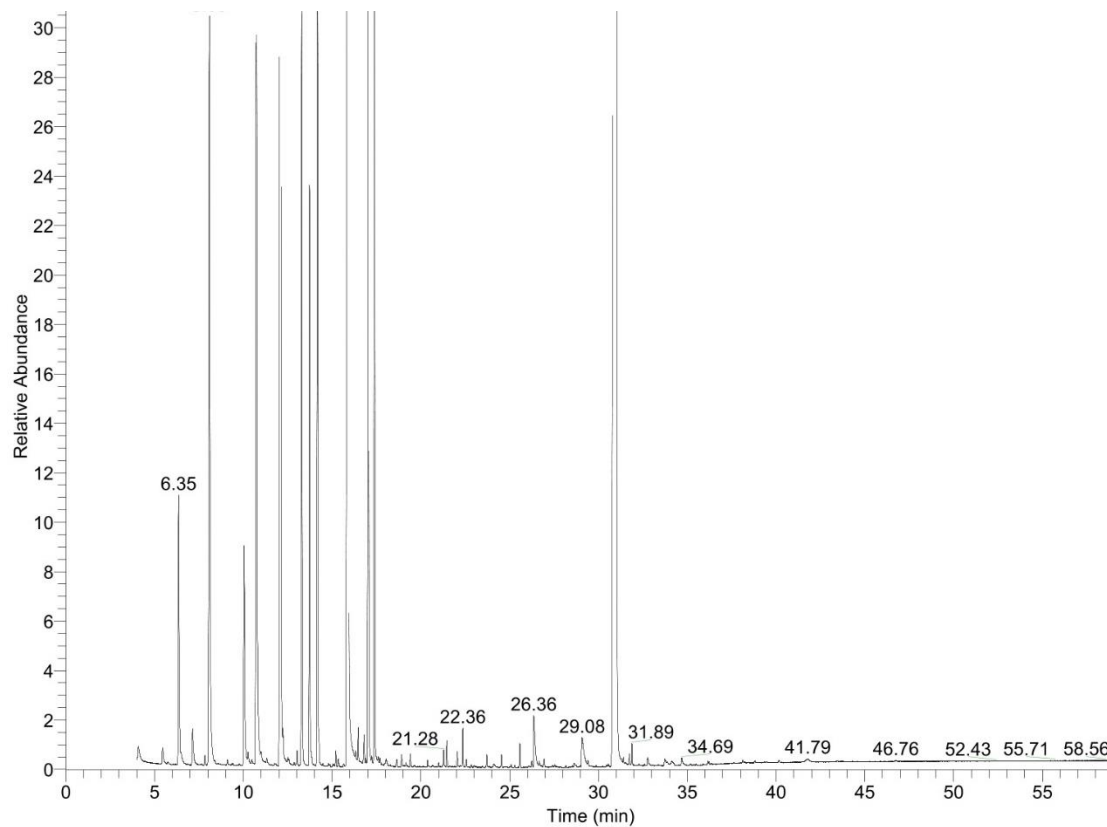
Příloha 13: Chromatogram těkavých látek ve vzorku C04



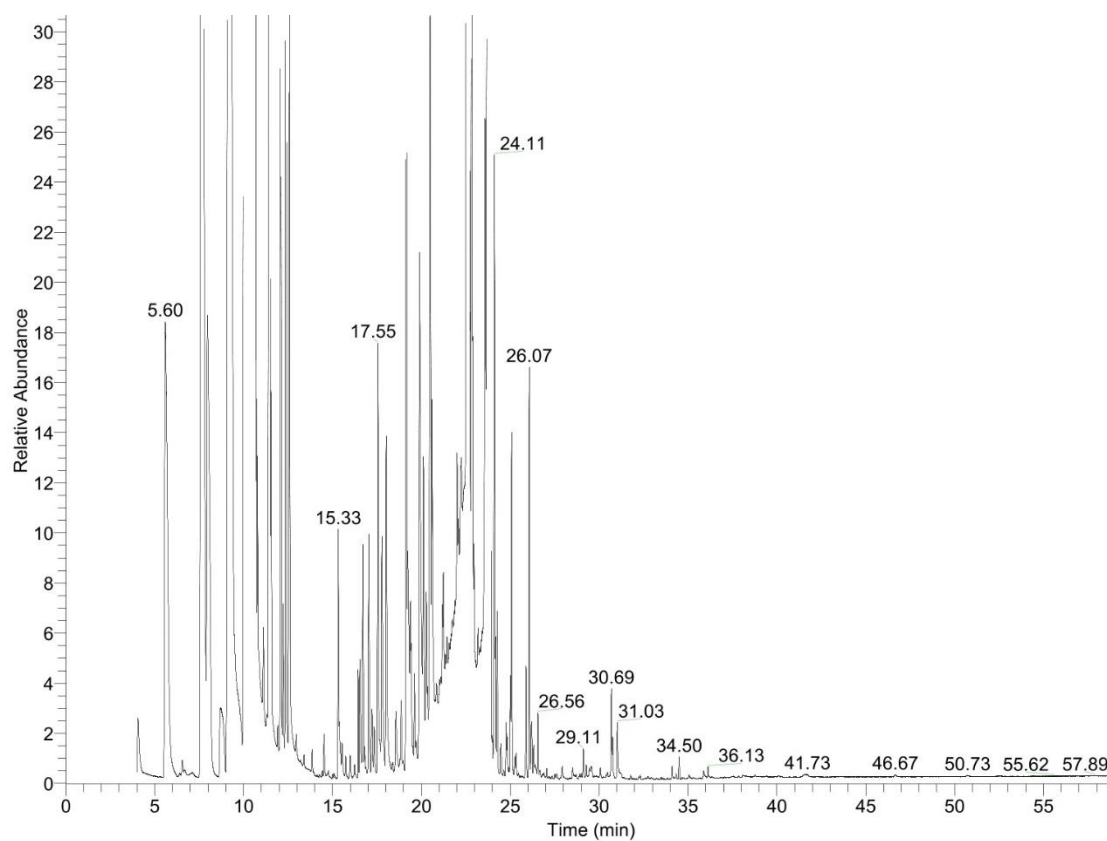
Příloha 14: Chromatogram těkavých látek ve vzorku D01



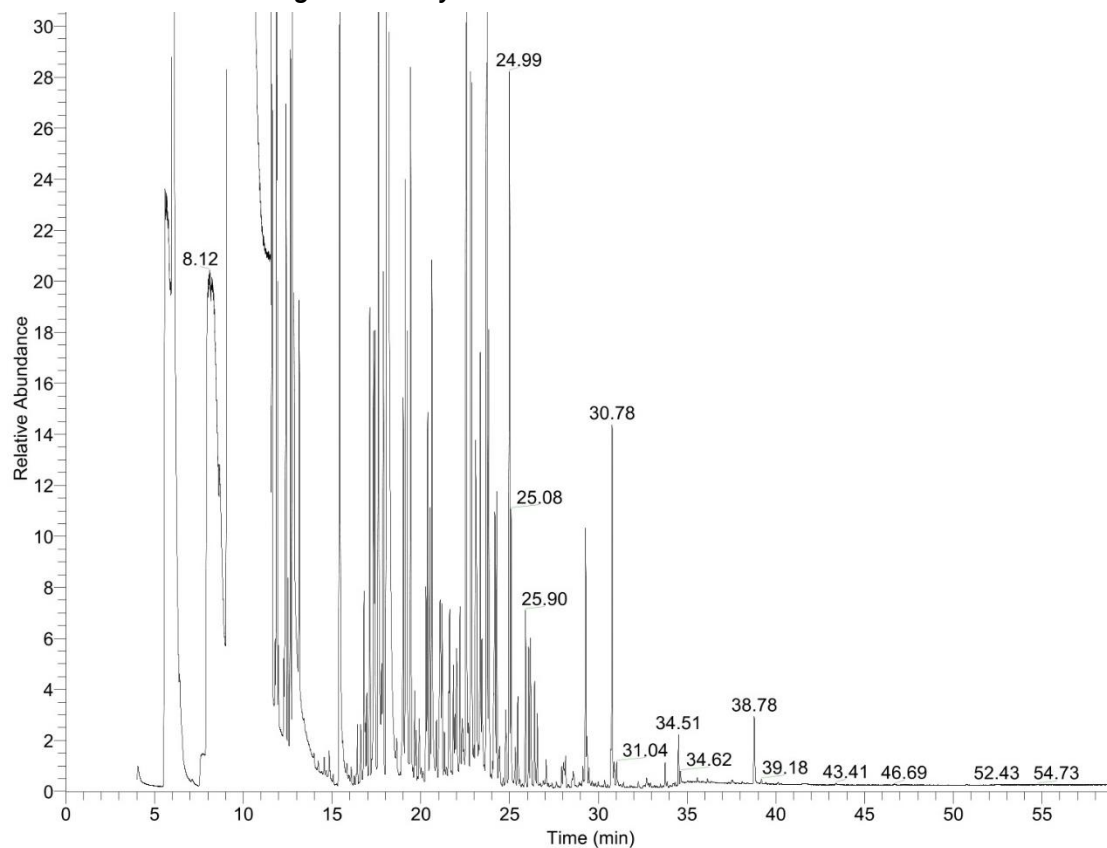
Příloha 15: Chromatogram těkavých látek ve vzorku D02



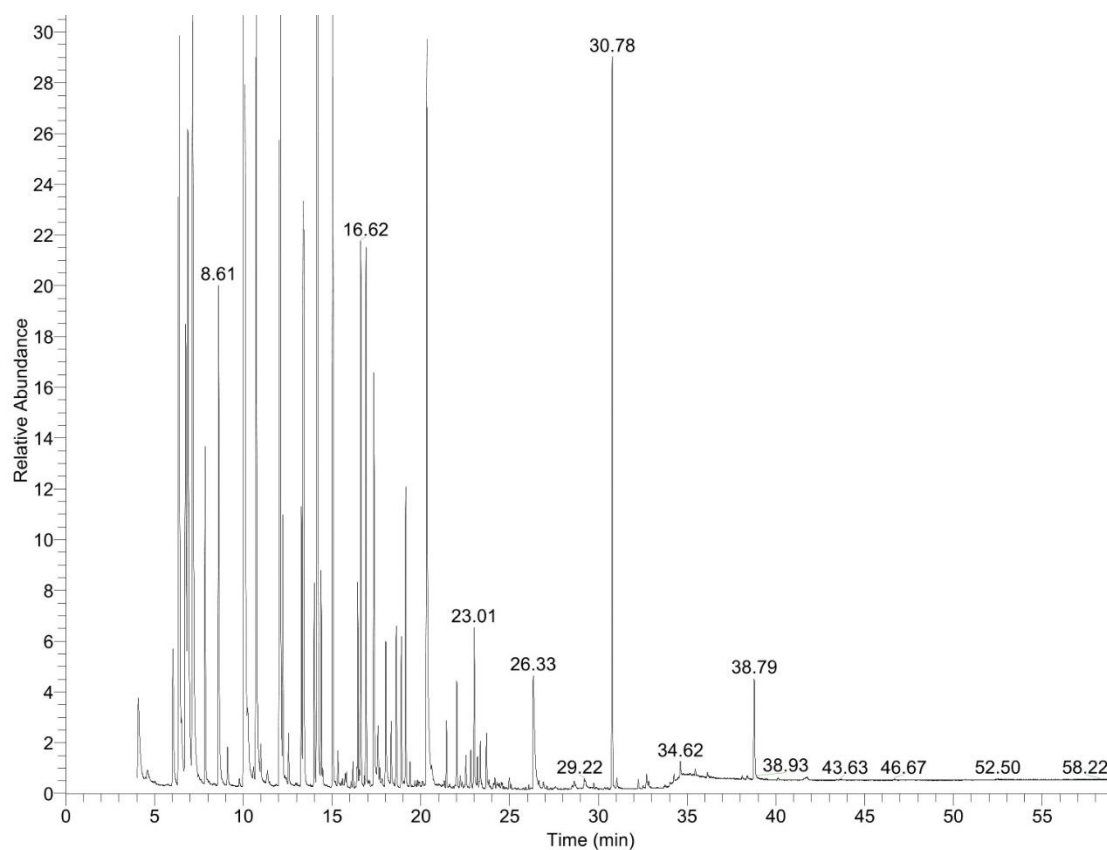
Příloha 16: Chromatogram těkavých látek ve vzorku D03



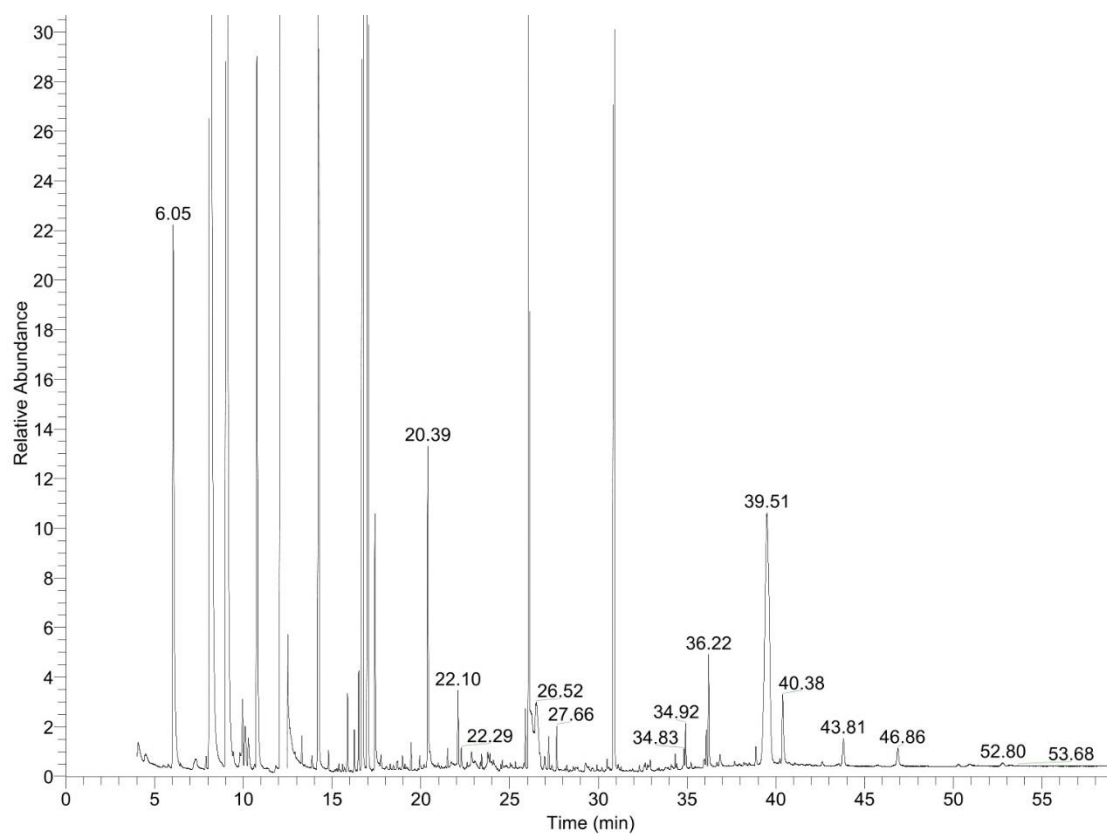
Příloha 17: Chromatogram těkavých látek ve vzorku E01



Příloha 18: Chromatogram těkavých látek ve vzorku E02



Příloha 19: Chromatogram těkavých látek ve vzorku E03



Příloha 20: Slovní hodnocení barvy vzorků oranžové barvy

Pos.	A01	B01	C01	D01	E01
1	čirá oranžová	matná oranžová	lesklá oranžová	tmavě oranžová	světle oranžová
2	intenzivní oranžová	intenzivní citrónová	intenzivní žlutá, trochu dozelená	středně intenzivní matná žlutá	středně intenzivní žlutá
3	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová
4	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová
5	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová
6	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová
7	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová
8	velmi světlá, průhledná, charakter. textura	jasná, znatelné šrafování	jasně oranžová	velmi sytá, až červená	tmavší, neprůhledná
9	průhledná, příjemná	příjemná oranžová	příjemná oranžová	tmavší oranžová s bílým povrchem	oranžová s bílým povrchem
10	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová
11	průsvitná, výrazná	výrazná, lesklá	intenzivní, lesklá	matná, sytá	méně výrazná, matná
12	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová
13	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová	oranžová
14	oranžová	oranžová	oranžová	červeno-oranžová	žlutooranžová
15	oranžová	světle oranžová	oranžová	oranžová	oranžová

Příloha 21: Slovní hodnocení barvy vzorků zelené barvy

Pos.	A02	B02	C02	D02	E02
1	zelená	zelená	zelená	zelená	zelená
2	okrově-zelená, průhledná	lesklá, tmavší zelená	lesklá, tmavší zelená	světle zelená	zelená, trochu svítivá, průhledná
3	světle zelená (dohnědá)	tmavě zelená	zelená	světle zelená	zelená
4	zelená	zelené	zelená	zelená	zelená
5	zelená	zelené	zelená	zelená	zelená
6	zelená	zelená	zelená	zelená	zelená
7	žlutohnědá	zelená	zelená	zelená	zelená
8	více do žluta	zelená	zelená	světle zelená	světle zelená
9	zelenožlutá	tmavě zelená	tyrkysová	žlutozelená	žlutozelená
10	žlutá	zelená	zelená	nehomogenní žlutozelená	-

Pos.	A02	B02	C02	D02	E02
11	nepříjemná	nejtmavší, lesklá, intenzivní šrafování	typická, atraktivní	světlejší	velmi světlá, průhledná, pravidelné šrafování
12	tmavá, odstín jiný	sytá, lesklá, shodná	sytá, lesklá, shodná	světlá, nevýrazná	méně výrazná, matná
13	žlutozelená	mentolová	mentolová	světle zelená	žlutozelená
14	zelená	zelená	zelená	zelená	zelená
15	žlutá	světle zelená	světle zelená	zelená	zelená

Příloha 22: Slovní hodnocení barvy vzorků žluté barvy

Pos.	A03	B03	C03	D03	E03
1	tmavě žlutá	svítivě žlutá	žlutá	matná žlutá	svítivě žlutá
2	tmavě žlutá	neonově žlutá	žlutá	světle žlutá	bíložlutá
3	žlutá	žlutozelená	žlutá	světle žlutá	světle žlutá
4	žlutá	žlutá	žlutá	žlutá	žlutá
5	žlutá, až do oranžova, průsvitná	citrónově žlutá, lesklá, až nazelenalá	žlutá, lesklá	matně žlutá, světlá	matně žlutá, průsvitná
6	tmavě žlutá až oranžová	sytě žlutá	tmavě žlutá	méně intenzivní žlutá	světle žlutá
7	žlutá	žlutá	žlutá	žlutá	žlutá
8	žlutá	světle žlutá	žlutá	světle žlutá	světle žlutá
9	-	-	-	-	-
10	žlutooranžová	zelenožlutá	žlutá	běžovo-žlutá	světle žlutá
11	intenzivní	intenzivní	středně intenzivní	středně intenzivní	středně intenzivní
12	jasně žlutá (malé odlesky oranžové), lesklá	lehce nazelenalá	žlutá	žlutá s cukerným bílým povlakem	žlutá s cukerným bílým povlakem
13	tmavě žlutá	čistě žlutá	žlutá	žlutá	světle žlutá
14	žlutá	světle žlutá	žlutá	světle žlutá	žlutá
15	tmavě žlutá	žlutá	žlutá	žlutá	bíložlutá

Příloha 23: Slovní hodnocení barvy vzorků červené barvy

Pos.	A04	B04	C04
1	červená, trochu tmavší, průsvitná	červená, s trochou růžové, lesklá	červená, s trochou oranžové
2	tmavě červená	narůžovělá	červená
3	červená	růžová	slabo červená
4	červená	červená	červená
5	průsvitná, červená	lesklá, intenzivně růžová	lesklá, světle červeno-růžová
6	rudá	sytě růžová až červená	červená
7	červená	červená	červená

Pos.	A04	B04	C04
8	tmavě červená	červenorůžová	červená
9	červená	červenorůžová	červená
10	příjemná	příjemná	příjemná
11	vínová	růžová	červená
12	hladký, lesklý	světlejší čárky	bílé odřeniny
13	tmavě růžová	intenzivní tmavá růžová	červená
14	lesklá červená barva	narůžovělá	červená, posypaná cukrem
15	tmavě červená	červená	červená

Příloha 24: Slovní hodnocení vůně oranžových vzorků

Pos.	A01	B01	C01	D01	E01
1	nasládlá	žádná	bez vůně	žádná	žádná
2	ovocná	sladká	citrónová	žádná	žádná
3	nevýrazná	sladká, těžko poznatelná	sladká, těžko poznatelná	nevýrazná	nevýrazná
4	velmi výrazné cukrové aroma, ovocná vůně neznatelná	příjemně slabé pomerančové aroma	pomerančové aroma, drobně výraznější než u vzorku A020	-	-
5	skoro nic není cítit, jemná, pomeranč	nepoznatelná	nejde rozpoznat, nasládlá	jemně pomerančová	jemně pomerančová
6	-	syntetický pomeranč	pomeranč	-	-
7	bez aroma	ovocná	bez aroma	bez aroma	nepříjemně ovocná
8	slabá, nepříjemná, jakoby umělá	velmi intenzivní, typický pomeranč	poměrně intenzivní, mírně pomerančová	velmi slabá až nevýrazná	nevýrazná
9	málo intenzivní	ovocná citrusová	sladká	málo intenzivní, ovocná	ovocná
10	pomeranč, mandarinka	bez aroma	pomeranč, do sladka	bez aroma	bez aroma
11	nevýrazná, neznatelná	jemná, sladká s ovocným nádechem	slabá, sladká	prakticky neznatelná	velice slabá až neznatelná, sladká, citrónová
12	silnější sladké vůně, příjemná	příjemná, pomeranč	velmi slabé, příjemné	velmi slabé, příjemné	Necítím
13	umělá, slabá	voní slabě	velmi příjemná, pomerančová	neznatelná	slabě pomerančová, příjemná
14	nevýrazná	méně výrazné, charakteristicky pomerančové	nevýrazná	méně výrazná, nasládlá	nevýrazná

Pos.	A01	B01	C01	D01	E01
15	nasládlá vůně	nevýrazná vůně	nasládlá vůně	nevýrazná vůně	nevýrazná vůně

Příloha 25: Slovní hodnocení vůně zelených vzorků

Pos.	A02	B02	C02	D02	E02
1	ovocné aroma žádné, velmi slabá cukrová vůně	-	příjemně ovocné (limetkové) aroma bez příchutí	velmi slabé cukrové aroma	-
2	žádná	jablečná	jablečná s nějakou neidentifikovatelnou vůní	neznatelná	jablko
3	ovocná, málo výrazná	sladká	sladká	nevýrazná	nevýrazná
4	neznatelná, nerozpoznatelná	nerozpoznatelná	nerozpoznatelná, nasládlá	nerozpoznatelná	jemná, nerozpoznatelná
5	-	jemná jablečná	neidentifikovatelný příchutí	-	-
6	slabá, nelze identifikovat	jablečná ale sladká	jablečná ale sladká	bez vůně	bez vůně
7	nepříjemná	slabě znatelná	málo intenzivní jablečná	jablečná, málo výrazná	jablečná, výrazná
8	sladká, ovocná	ovocná	umělé ovocná	sladká	citrusové plody
9	bez aroma	kiwi	bez aroma	bez aroma	citrón
10	bez aroma	do kysela	slabá, sladká	bez aroma	bez aroma
11	prakticky neznatelná, mírně nepříjemný ocásek	poměrně slabá	silnější, příjemná, ovocná	slabá, téměř neznatelná, nelze identifikovat příchutí	slabší, ale příjemná
12	bez vůně	mírně ovocná, sladká	sladká	bez vůně	bez vůně
13	méně výrazná, ale příjemná	nevýrazná	méně výrazná, nasládlá	nevýrazná	výraznější, charakteristická jablečná
14	sladká jablečná	příchutí jablečná	příchutí jablečná	-	jablečná
15	nevoní	nevoní	nevoní	nevoní	nevoní

Příloha 26: Slovní hodnocení vůně vzorků žluté barvy

Pos.	A03	B03	C03	D03	E03
1	žádná	citrónová	citrónová	citrónová	citrónová
2	jako bonpari, sladká	neznatelná	slabě citrónová	neznatelná	citrónová, svěží
3	nevýrazná	ovocná, citrónová	ovocná sladká (jinak těžko identifikovatelná)	nevýrazná	nevýrazná
4	ovocná, citrónová	bez	cukrová	bez	bez
5	sladká, ovocná	sladká, ovocná, citrónová	sladká	neznatelná	neznatelná
6	slabé, ovocné	žádné	slabé ovocné	žádná	velmi slabá, neidentifikovatelná vůně
7	slabá cukrová vůně, ovocné aroma neznatelné	příjemné citrónové aroma bez příchutí	relativně výborný mix ovoce a cukrové vůně	-	slabě ovocná vůně bez ztelných příchutí
8	lehce citrusová	nasládlá, lehce citrónová	sladká, nelze přesně určit	neznatelná	neznatelná
9	-	-	-	-	-
10	neznatelná	citrónová, nakyslá	slabá, nasládlá	slabá, neutrální	slabá, sladká
11	-	-	-	-	-
12	-	-	-	-	-
13	-	-	-	-	-
14	nevýrazná	nasládlá	slabá	nevýrazná	nevýrazná
15	slabá	ovocná	nevýrazná	slabá	slabá

Příloha 27: Slovní hodnocení vůně vzorků červené barvy

Pos.	A04	B04	C04
1	jemná, jahodová, sladká	jahoda	jahoda
2	lesní jahody, svěží	umělá jahoda, nepříjemná	jahodová, příjemná
3	ovocná, jahodová	nevýrazná, těžko identifikovatelná	sladká, těžko identifikovatelná
4	bez vůně	ovocná	Ovocná, bobule
5	sladká, mírně ovocná	sladká, ovocná	intenzivně sladká
6	jahodová	velmi sladká ovocná	jahodová
7	poměrně výborný, mix cukrové a ovocné vůně	výborné "cukrové" aroma přebíjející ovocnou vůni	výborné nepříjemné ovocné aroma (umělé)
8	lesní plod, malina	ovocná, žvýkačka	ovocný, jahoda
9	téměř neznatelná, lehce jahodová	lehce malinová	jahodovo-vanilková
10	nevýrazná	méně výrazná	výrazná
11	neutrální, slabá	ovocná, umělá, slabá	jahodová, příjemná

Pos.	A04	B04	C04
12	nic necítím	tak slabé, že to nepoznám	po moučkovém cukru, cukrový vatě
13	-	-	-
14	-	-	-
15	slabá, nevýrazná	sladká, umělá	sladká, jahodová

Příloha 28: Slovní hodnocení chuti oranžových vzorků

Pos.	A01	B01	C01	D01	E01
1	sladká chuť, méně výrazná příchut'	dobrá, kyselejší	-	dobrá, příjemně kyselé	dobrá, jemná příchut' pomeranče
2	ovocná, přípach kovový	citrónová	citrus, ovocná	citrus, mouka	ananas
3	pomerančová, slabá pachut'	ovocná, sladká, pomerančová	sladká, těžko poznatelná (ovoce) - pomeranč až po čase	sladká, ovocná, nepříjemná pachut'	sladká, ovocná, pomerančová
4	výborná cukrová i ovocná chuť, ovocné aroma, výrazný pocit umělých sladidel	příjemně vyvážená (kyselé x sladká) ovocná chuť, v první chvíli nepříjemné aroma	první pocit slabě kyselý, poté se rozvíjí především cukrová chuť přebíjející pomerančovou	příjemná kombinace pomerančové a cukrové chuti, pomerančová chuť časem sílí	na začátku lehce kyselé chuť přecházející do sladké s příjemně výrazným pomerančovým aroma
5	intenzivní chuť, pomerančová, příjemná	příliš sladká, nepřírozená	multivitaminová chuť, chutná nepřírozeně, uměle	příjemná pomerančová chuť	v první chvíli nepříjemná, intenzivní, ale umělá
6	intenzivně sladká a aromatická, těžko identifikovatelná příchut'	jemná pomerančová, zjevně syntetická příchut'	sladce pomerančová	sladká, lehce aromatická	intenzivní a komplexnější, strukturovaná
7	zvláště sladké	pomerančové, sladký	pomerančové, velmi sladký, mango	mandarinky, pomeranč, mango, velmi sladký	pachut' na počátku, velmi sladký, mango
8	výrazná umělá chuť, nelze jednoznačně definovat aroma	pomalé uvolňování chuti, výrazná pomerančová	intenzivní chuť, avšak rychle odeznívá, za chvíli bez chuti	pomalejší nástup chuti, méně výrazná, téměř bez ovocného aroma	slabší, rychle odeznívá, mírně trpká, pomerančová

Pos.	A01	B01	C01	D01	E01
9	ovocná, silnější pachů, umělá	příjemná ovocná chuť	velmi sladká, umělá	sladká, ovocná, příjemná	ovocná, zvláštní chuť, nezvyklá
10	exotická, mango?, sladká	pomeranč, kyselejší, umělá chuť	nelze identifikovat příchů, sladké, umělá chuť	pomeranč, sladká, opět cítím trochu umělejší chuť	sladká, pomeranč, mango, mandarinka
11	sladká, lehce citrónová, nádech exotického ovoce	kyselá a sladká, citrusovo-pomerančová	sladká s kyselým nádechem, lehce citrusové aroma	kyselosladká, ovocná s pomerančovým tónem	sladkokyselá, pomerančovo-mandarinková
12	chuť jde cítit hned od začátku	pomerančová, sladká	příjemná, sladká	chutná, sladká, občas méně kyselá chuť	sladká, ovocná, pomerančová, chutná
13	výrazná chuť, celkem příjemná	sladká, ale nic víc, nepříjemná pachů	hodně umělá, ale pomerančová	méně výrazná, nasládlá, ze začátku silná pachů	výrazná, spíše umělá, kyselá
14	výraznější, mírná pachů, není moc charakteristická	výrazná, charakteristická	není výrazná, není zcela charakteristická	výraznější, charakteristická	výrazná s umělou pachutí
15	výrazná, příjemná, vynikající	výborná	výrazná	méně výrazná	méně výrazná

Příloha 29: Slovní hodnocení chuti zelených vzorků

Pos.	A02	B02	C02	D02	E02
1	velmi výrazná příchů zeleného čaje, na začátku lehce nahořklá	velice příjemná jablečná chuť, která není přelita cukrovou chutí	příjemně sladká citrusová chuť, po čase začíná převažovat cukrová chuť	chuť celkově nevýrazná, nepříjemné neidentifikovatelné aroma	velmi příjemná sladce ovocná chuť, doplněna lehce kyselou ovocnou chutí
2	jablečná ještě s nějakou chutí vzadu, ale jde to dohromady	jemná jablečná, kyselejší (pak už ne)	jablečná	jablečná, jemná	jablko, mentol
3	ovocná, jablečná	ovocná, jablečná	sladká, slabě jablečná, nepříjemná pachů	nepříjemná pachů	jablečná
4	příjemná, mírně kyselá, jablečná	výborná jablečná chuť	jablečná chuť, působí trochu uměle	sladká chuť, jablečná, jemně nakyslá	kyselá chuť moc výrazná

Pos.	A02	B02	C02	D02	E02
5	intenzivně sladká a krátká (aroma odpadne)	výrazná jablečná chuť podepřená sladko kyselostí	jablečná, velmi sladká	slabá příchut', prázdný drops	bohatá komplexní chuť jablek
6	příjemná, ne tolik intenzivní, není ovocná	silná, jablečná	příjemná, není ovocná jak jablečná chuť	jablečná	jablečná, příjemná
7	-	-	-	-	kyselá, jablečná, umělá
8	ovocná chuť, příjemná zpočátku, poté pachuť	melounová chuť, příjemná	nedobrý na začátku, velmi sladký, umělá pachuť	sladké hodně, hruška	sladké, poté kyselé, příjemná, poté sladká
9	exotická, ananas, mango?, sladká	exotická, kiwi, výrazná, více cítit kyselost než v A01Z	ne příliš dobrá chuť, pachut' plastu	chuť příjemná, kiwi, méně výrazná	ne příliš dobrá chuť, připomíná mi to bonbóny z lékárny
10	sladké, slabě kyselá	kyselé ze začátku, pak přechází do sladké	ze začátku sladké, ke konci velmi sladké	ze začátku pachuť, pak trochu kyselé	nepříjemně sladká, trochu do kysela
11	výrazná chuť s bylinkovým ocáskem, mírně nakyslá	příjemná, pozvolně nastupující, po narušení struktury mírně perlivá	spíše kyselejší a trpčí, zvláštní ovocná příchut', bylinková pachuť	ze začátku příjemná, poté mírně do kysela, rychle odeznívá	velmi výrazná chuť
12	sladká ovocná s jablečným nádechem	kyselejší, ovocná s příchutí kiwi	sladká, méně výrazná, jemně ovocná	sladkokyselá, jablečná, ovocná	kyselá, ovocná až jablečná
13	výrazná, charakteristická , harmonická, příjemná	výrazná, příjemná, ne moc charakteristická	ne moc charakteristická , příjemná	charakteristická jablečná	výrazná, charakteristická
14	jablečná	jablečná	jablečná	jablečná	jablečná
15	ovocná	sladká	kyselkavá	kyselkavá	sladkokyselá

Příloha 30: Slovní hodnocení chutí žlutých vzorků

Pos.	A03	B03	C03	D03	E03
1	kyselý citrón a příchut' ještě jiná	citrón, jemný, ne moc kyselý	trochu citrón	citrón, kyselejší	citrón + jiná příchut', sladší ovoce
2	kyselá, příjemná, citrónová	citrónová, sladká	nevýrazná příchut', hodně sladká	zprvu nijaká, citrónová, později kyselá	nedobrá, shnilý citrón

Pos.	A03	B03	C03	D03	E03
3	citrónová, na začátku slabá pachuť	citrónová	sladká, citrónová	sladká, citrónová, pachuť - přetrvávající	sladká, žvýkačková
4	typická citrónová kyselá, místy jemně hořká, zároveň sladká	intenzivní citrónová, umělá, velmi sladká	Příjemná, ne tak intenzivní citrónová, lehce sladší	sladká, postupně se zvyšuje citrónová chuť	výrazná ovocná, spíše banánová, příjemná chuť, sladká, bez známek pachuti
5	sladkokyselá, výrazně ovocná	výrazně citrónová, hodně intenzivní, kyselosladká	výrazně sladká, ovocná	intenzivní citrónová, výrazně kyselá	intenzivní sladká, ovocná, intenzivní pachuť
6	sladká, lehce kyselá, citrónová	méně sladká, více citrónová	více sladká	nepříjemná, sladkokyselá	více sladká, málo kyselá, slabá chemická pachuť
7	nepříjemný mix, výborně sladké, kyselé a umělé ovocné chutě	velmi příjemný mix sladké a kyselé chuti s výborným ovocným aroma	velmi výborná cukrová chuť, která přebíjí nepříliš výborné ovocné aroma	postupně sílí cukrová chuť přebíjející kyselost, ovocná chuť nepříliš výborná, ale agresivní	převažující sladká chuť nad ovocnou, ovšem celková chuť příjemná bez aromat
8	jemně nakyslá, ale dobrá, citrónová	citrónová, příjemná	jemná, není příliš intenzivní	citrónová, kyselejší	na první ochutnání velmi umělá, chutná banánovo-citrónově
9	ovocná	sladká, nahořklá	sladká, jemně ovocná	-	-
10	kyselý, umělý	kyselá melounová	sladká, citrónovo-pomerančová	sladká, citrónová	sladká, mírně nakyslá neutrální
11	jinak kyselý než ostatní	není poznat druh příchutě	méně výrazný	nevím druh příchutě	ananas příjemně cítím
12	příjemná citrónová	sladká slabě, taková nijaká	sladká s divným ocasem	sladkokyselá chuť, ne úplně citrónová	sladká necitrónová chuť (umělá)
13	citrónová, dost sladká	citrónová s hořčinkou (kůra)	slabá a krátká citrónová	větší intenzita po citrónu	intenzivní a komplexní po citrónu
14	citrónová	sladká, jemná	nevýrazná	sladká	citrónová
15	více citrónová	kyselková	sladká	kyselková	citrónová

Příloha 31: Slovní hodnocení chuti červených vzorků

Pos.	A04	B04	C04
1	jahodová	jahodo-malina	sladká jahoda
2	jahodová, slabě kyselá, sladká	chutná uměle, jahoda neznatelná	chutná jako jahodový pudink
3	ovocná, jahodová	ovocná, lesní ovoce	ovocná, jahodová
4	méně ovocná, jemně kyselá, méně sladká	více ovocná, středně sladká, bez kyselosti	velmi charakteristická, jahoda, sladká, bez kyselosti
5	intenzivně jahodová, sladká, mírně kyselá	výrazně kyselá, znatelná pachut'	výrazně jahodová, sladká
6	výrazně jahodová, velmi slabě kyselá	velmi sladká, silná pachut'	jahodová, chemický podtón
7	velice vyrovnaná cukrová chuť, přebíjející až ostatní, lehké ovocné aroma, příjemné	středně intenzivní nepříjemně ovocná chuť s poměrně výrazným cukrovým aroma	sice výrazně ovocná, ale nepříjemná chuť
8	lesní ovoce	jahodová	jahoda a maliny
9	výrazně jahodová	chuť lesní směsi (jahody, maliny)	jahoda, působí uměle
10	příjemná ovocná	sladká, neidentifikovatelná s pachutí	sladká, neidentifikovatelná s pachutí
11	jahodová, umělá, kyselosladká	kyselá, ovocná, malinovo-ostružinová	kyselejší, umělá, vodnatá chuť
12	taková umělá jahoda, dokyselená	méně výrazná, méně umělá jahoda	hodně intenzivní jahoda, ale sladší než "živá"
13	výrazně jahodová	umělá, nepříjemná	autentická jahodová
14	sladká, jahodová chuť, malinko nakyslá	nijaká sladká	nejblíže chuťově kompotovaným jahodám
15	příjemně jahodová	umělá, nepříjemná	ovocná, kyselková

Příloha 32: Slovní hodnocení celkové přijatelnosti vzorků oranžové barvy

Pos.	A01	B01	C01	D01	E01
1	-	-	sladko-kyselý příjemně	-	příchuť pomeranče
2	atraktivní, avšak chuť smíšená a nepříjemný pocit plaku na zubech	sladkost přebíjí ovocnou chuť	intenzitu chuti zeslabuje s časem konzumace	vadí příchuť prášku, ve kterém byl produkt obalen, velikost produktu	vyvážený, ale ananasovou chuť nepreferuji
3	přetrvávající pachut'	-	-	přetrvávající nepříjemná pachut'	-
4	ve vůni i chuti převažuje cukrové aroma	velmi příjemná chuť, vůně sice slabší, ale	sice slabá, ale příjemná vůně, chuť také	nejvýraznější ovocná chuť ze vzorků,	velmi výborná pomerančová

Pos.	A01	B01	C01	D01	E01
	nad ovocným, ovocná chuť velmi umělá	velmi příjemně ovocná, výsledkově bez problému	příjemná, vzhled bez vad	chybějící vůně vede ke snížení hodnocení, minimálně bezvodný	chuť, vzhled bez odchylek
5	chuť intenzivní, příjemná, vůně intenzivní málo	chuť byla trochu umělá, moc sladká	chuť umělá, ne příliš příjemná	chuť příjemná, vyvážená	ne moc příjemná chuť, umělá
6	příliš sladký, aromatický v chuti	vyváženě sladký (kyselý), aromatický	dobře vyvážená sladkost a aromatika	intenzita jen díky sladkosti	i přes větší sladkost má dobrou strukturu chuti, složitější
7	velmi sladká	příjemná chuť	příjemná chuť, možná kdyby byl méně sladký	příjemná chuť, ale lepší by to bylo, kdyby byl méně intenzivní	na začátku byla trochu umělá pachut'
8	zvláštní a poměrně nepříjemná (umělá) chuť a vůně	kontinuální uvolňování aroma, není výrazně sladký	rychle odeznívá chuť, rychle se rozpadá struktura	slabá vůně, téměř bez chuti	slabá vůně, poměrně intenzivní a výrazná chuť
9	vyvážená chuť, neznatelné aroma, silnější pachut'	dobrá chuť i aroma, silnější pachut'	příliš sladký	příjemná chuť, vyvážená	zajímavá chuť, příjemná vyvážená chuť, hořká?
10	příjemná chuť, barva, mírná nehomogenita ve struktuře	příliš umělá chuť pomeranče	velmi špatná chuť, umělá, nerozeznatelná příchut'	chuť relativně dobrá, mírná pachut' uměliny, barva přijatelná	chuť velmi dobrá a barva příjemná
11	ve všech aspektech pozitivní	výraznější, snadno rozpoznatelná chuť, dobrá barva	málo intenzivní příchut', nevyvážená chuť, malý	dobrá kombinace a intenzita chuti	vyvážená, příjemná chuť
12	hladký povrch, intenzivní vůně	drsnější povrch	slabá vůně	slabá vůně	slabá vůně, drsnější povrch
13	příjemná chuť, nevýrazná vůně, nejméně příjemná barva	chuť s pachutí, vůně nezřetelná, barva dobrá	pěkná barva, vůně příjemná, dobré vyvážení sladkosti a kyselosti	nejlepší barva, ale vůně neznatelná a chuť velmi sladká, ale nedobrá	pěkná barva i vůně, ale chuť s pachutí a nejvíc kyselý
14	mírná pachut' (z obalu?), ne moc charakteristická	charakteristická chuť pomeranče, bez pachutě	nevýrazná, necharakteristická a příliš sladká chuť	výraznější, charakteristická pomerančová příchut'	výrazná aromatická pachut'

Pos.	A01	B01	C01	D01	E01
	pomerančová příchuť				
15	-	celkem sladký	příliš sladký	nepříliš sladká a trochu kyselá chuť	-

Příloha 33: Slovní hodnocení celkové přijatelnosti vzorků zelené barvy

Pos.	A02	B02	C02	D02	E02
1	nejintenzivnější chuť, barva odpovídající příchuti, sladké aroma	nejpříjemnější chuť, vzhled bez vad	velmi příjemně ovocná chuť i vůně, příjemná barva	nevýrazná barva, nepříjemná chuť, prakticky bez vůně	"lákající" barva, velice příjemná chuť
2	příjemná barva, chuť nebyla chvíli rozeznatelná, dlouho vydržel	ze začátku kyselý, poté to ustoupilo, rozpadl se mi na dvě části, barva příjemná, chuť vydržela po celou dobu cumlání	jemná chuť, slabá někdy, barva byla příjemná	barva byla průměrná, ničím zvláštní, prostě zelená, ale chuť byla super, opravdu cítit jablko, sladkost kyselost byla vyvážená a chutnalo to	cítla jsem tam jakousi příchut' mentolovou, nebo co to bylo, to ho kazilo, jinak kyselost sladkost dobrá, barva těž, ale dala bych si jí klidně znovu
3	-	-	přetrvávající pachut'	nepříjemná přetrvávající pachut'	nepříjemná pachut'
4	příjemná chuť, vyvážená není přesládlá	výborná, vyvážená chuť, jen trochu moc sladká	chuť je výrazná, dobrá, ale trochu umělá	výrazná chuť, dobrá i když jemně nakyslá	výrazně kyselejší chuť přebíjí sladkou
5	velmi sladký, "zalepí"	primární je jablečná chuť, až pak sladkost a kyselost, velmi harmonické	jablečná chuť opřená o horu cukru	málo aromatický, "o ničem"	bohatá aromatika v chuti, více sladký než je třeba
6	hladký povrch, ne tolik sladký, mírná pachut'	velmi sladká, občas mírně kyselý	drsnější povrch, konečná chuť se projeví až po chvíli, slabá pachut'	drsny povrch, příjemná chuť	chutná, jablečná chuť, bez vůně
7	nehezka barva, ne moc pěkná vůně, sladká, výrazně	intenzivní, zelená barva, vůně neznatelná,	velmi pěkná barva, vůně slabá, sladká chuť, jablečná	nevýrazná, barva, příjemná vůně,	slabá, ale pěkná barva, pěkná vůně, výrazná chuť,

Pos.	A02	B02	C02	D02	E02
	jablečná chuť, příjemná	příjemná sladkost ale s pachutí		nepříjemná chuť	kyselá ale umělá
8	zpočátku dobrá chuť, poté silnější pachutí	dobrá chuť	nedobrá chuť, sladká, silná pachutí	sladká a silná ovocná (hruška?)	střední intenzita vůně, více sladké, silnější pachutí
9	příjemná chuť i vzhled, žádná pachutí	příjemná chuť i vzhled	pachutí, umělina, barva ale přijatelná	dobrá chuť i vzhled	ne příliš dobrá chuť, vzhled v pořádku
10	má příjemnou chuť, ke konci ale už příliš sladkou	chuť je mi nepříjemná	velmi sladký	má zvláštní pachutí	velmi sladký
11	oproti dalším vzorkům netypická, ale vyvážená chuť	vyvážená nasládlá chuť bez negativních vlastností podržená poměrně dobrou vůní	hodně nakyslý a trpký, nepříjemná pachutí	především horší chuť, po chvíli konzumace téměř bez chuti	sladší, ale hodně výrazný vzorek
12	barva výrazně odlišná od standardu, chuť vynikající	chuť méně výrazná s výraznějším kyselým tónem	chuť celkově slabší, bez výrazně dominantní příchuti	výraznější, dobře identifikovatelná chuť, příjemný v ústech	výraznější chuť, dobře se cucá
13	-	-	neznatelná jablečná příchutí, špatná struktura hmoty (ostré kousky)	bohatá chuť, charakteristická jablečná	charakteristická jablečná chuť, lehká pachutí
14	příjemná chuť a kyselost	více sladké	podobné jako vzorek A02Z	málo kyselé	příjemná příchutí
15	-	-	-	-	-

Příloha 34: Slovní hodnocení celkové přijatelnosti vzorků žluté barvy

Pos.	A03	B03	C03	D03	E03
1	kyselejší chuť, ze začátku pachutí pak si člověk zvykne, barva nebyla sytá, nerazila do očí, příjemná, dlouho se	barva výrazná, svítivá, chuť kyselková, je to citrón, ale bonbón nedrží vcelku po celou dobu, a dráždí to dásně	barva přijatelná, chuť neznatelná někdy, slabá, spíše jen kyselá a sladká, žádná příchutí	chuť nastoupila později, kyselejší citrón, ale dá se zvyknout na to, barva přijatelná	Barva přijatelná, chuť je sladší, není to samotný citrón, ale s příchutí mi přijde, že se to dá cumlat do konce

Pos.	A03	B03	C03	D03	E03
	cumlá - pozitivní				
2	barva tmavá, vůně slabě citrónová a chuť dobrá	ošklivá barva, bez vůně, ale příjemná chuť	nejlepší barva, slabá vůně, a chuť nic moc, moc sladký	dobrá barva, neznatelná vůně, ale chuť příjemná	nepěkná barva, dobrá vůně, nejhorší chuť
3	-	-	-	na začátku pachut' přetrvávající	-
4	klasický bonpar, kyselejší, vyvážená chuť	umělý, celkový dojem nedobrý	velmi vyvážená chuť, lehce intenzivní vůně	chuť velmi kyselá, ale výrazně ovocná	zajímavá chuť, vyvážená, více sladší
5	-	-	-	-	-
6	neurazí ani nenadchne	po chvíli je cítit zvláštní chemická pachut'	velmi sladký	nepříjemná chuť, silná chemická pachut'	velmi sladký
7	velice nepříjemná chuť, neznatelné ovocné aroma, vzhled nepříjemný	velice příjemná chuť i vůně s ideální intenzitou, příjemný vzhled	příjemný vzhled, u vůně i chuti převažuje cukrové aroma nad ovocným	nepříliš lákaví vzhled, aroma, nepříjemně agresivní chuť	vzhled, vůně i chuť lehce nadprůměrná (příjemná)
8	vůně není moc znatelná, ale chuť dobrá	chuť působí trochu uměle, ale celkově dobrá	chuť sladká, působí uměle	chuť více kyselejší	chuť působí velmi uměle
9	příjemná ovocná chuť	nahořklé tóny	jemné ovocné tóny	jemné tóny bylin	umělá pachut'
10	umělý, překyselený	uměle sladký	nevýrazná chuť, spíše sladká	-	nasládlý, chuťově neutrální
11	jiný (možná jiná kyselina) než ostatní, je možné že se rychleji vycumlá?	byl veliký	-	-	nevoněl, ale to u dropsů nepovažuji za výraznou vadu
12	příjemná vyvážená chuť	výrazná chuť - tak hraničně, určitě bych si ty bonbóny koupila ještě jednou	strašně sladký ve smyslu, že to málo, co je cítit je jen jako kdybych jedla cukr	je sice příjemně kyselý, ale je zde cítit divný "ocas"	je takový nijaký, přijde mi umělý, nebo to je jen můj subjektivní názor, kdy od žlutého bonbónu

Pos.	A03	B03	C03	D03	E03
					očekávám citron - kyselost
13	sladší, celkem aromatický	méně sladký, málo aromatický	fádní	vyváženě sladký - kyselý, aromatický	dost sladký, bohatá chuť - aromatika
14	-	-	-	-	-
15	-	-	-	-	-

Příloha 35: Slovní hodnocení celkové přijatelnosti vzorků červené barvy

Pos.	A04	B04	C04
1	barva v pohodě, příjemná, není moc sytá, chuť trošku sladší, dlouho vydrží v účtech	barva přijatelná, chuť pokud to měla být jahoda, tak moc cítit nebyla, jednou kyselá pak sladká. Drops se rozpadl na dvě poloviny, poškrábalo dásně	barva přijatelná, chuť sladká, jahodová až moc
2	příjemná vůně, ucházející barva i chuť	ošklivá barva, nepěkná vůně a chuť	pěkná vůně i barva, nedobrá chuť
3	-	na začátku pachut', přetrvává delší čas	-
4	málo intenzivní vůně a chuť ovoce, oceňuji ale menší sladkost	vyvážená chuť mezi sladkým a kyselým, ovocná příchuť, středně intenzivní vůně	velmi intenzivní ovocná vůně, více - méně vyvážená chuť, jen více sladší
5	-	-	-
6	příjemná jahodová chuť	velmi silná pachut'	více chemická pachut'
7	extrémně cukrová chuť i vůně přebíjející až ostatní, vzhled velice příjemný	poměrně nepříjemná chuť, převažuje cukrovost nad ovocností, velice příjemný vzhled	nepříjemně umělá chuť i vůně, nepříliš lákavý vzhled
8	kyselost nastupuje později, není tak sladký	nevýrazný, opět mi vadí velikost, sladkost se projeví po vyplivnutí	jahoda moc nevýrazná a tolik mě neoslovila
9	chuť opravdu jahodová, příjemná (lépe chutná než vypadá)	chuť působí uměle, vzhled příjemný	chuť velmi umělá
10	nevýrazná vůně	nižší intenzita vůně, umělá chuť	umělá chuť
11	sladký, umělá chuť	umělé chutě ovoce, sladký	umělý, vodnatý, nakyslý
12	umělá chuť, ale když je nouze a není čokoláda	praskliny řežou do jazyka, méně umělá jahodová příchuť	vzhled horší, malá velikost, nepokouší se výrazná sladká chuť něco skrýt?
13	dost sladký, typicky aromatický	synteticky navoněný, téměř bez chuti, už od pohledu mírně odpuzující	dostatečně sladký i kyselý, skvělá aromatika
14	chuťově výrazný	nezaujal mě	nemám ráda kompotované jahody
15	sladký, umělá chuť	nevýrazný	umělá chuť